

EQ-16030QNT

多成分定量処理 プログラム



EQ-16030QNT

多成分定量処理 プログラム

装置を扱う前には、この取扱説明書を必ずお読みになり、記載されている内容をよく理解した上で、正しくお使いください。

ご注意

- 当社の事前了解なく、本装置を改造すること、当社製品以外の付属品などを装着すること、故障箇所を自ら修理すること（冷却系パイプ交換等）、また当社認定のサービス員限定の調整箇所（締め付けトルクの変更等）の調整は固くお断りします。故障、および事故につながりかねません。これに抵触する場合は、当社または当社関連会社による保証および保守契約の対象とならないことがありますのでご注意ください。
- 本装置の補修用性能部品（装置の性能を維持するために必要な部品）の保有期間は、設置後 7 年です。なお、この保有期間終了後の取り扱いについては、補修用性能部品保有期間満了前に、当社または日本電子データム㈱指定のサービス窓口にご相談ください。装置および部品の種類によっては、経年装置サービス料金を別途申し受けます。
- 本装置を安心してご使用頂くためには、お客様自身で行う日常点検が重要ですが、さらに、装置消耗部品の交換時、または装置管理する上で適切な時期、間隔で、当社指定のサービス員による装置全体の点検を受けられることをお奨めします。適切な装置管理・点検のない状態で発生した事故、故障については責任を負いかねます。
- 本装置を納入後に、移設（屋内外を問わず）や輸送が必要になった場合、および転売（移設を伴わない場合も含む）や廃棄を行う場合は、必ず当社または日本電子データム㈱指定のサービス窓口にご連絡ください。当社指定のサービス員または当社指定の技術者以外によって移設や輸送が行われた場合は、その後に生じた事故や故障について、当社は責任を負いません。特に設置が不十分なまま稼働されると、水漏れ、火災、感電等の事故が発生する恐れがあります。
- この取扱説明書および記述してあるソフトウェアの仕様・内容は、予告なく変更することがあります。
- この取扱説明書および記述してあるソフトウェアの内容は、作成に万全を期していますが、誤りや不備な点にお気づきのときは、当社または日本電子データム㈱指定のサービス窓口にお知らせください。なお、目的に応じた組み合わせができる特長をもつ装置としての性質上、いくぶん説明不足になりがちですが、その点ご理解の上ご了承願います。
- この取扱説明書および記述してあるソフトウェアを運用した結果の影響につきましては、直接的、間接的にかかわらず、当社はいっさいの責任を負いかねますので、ご理解の上ご了承願います。
- この取扱説明書および記述してあるソフトウェアの内容の一部または全部を当社に無断で使用、転載、複写することは禁止されています。
- この取扱説明書および記述してあるソフトウェアの使用に際し、製品に「ソフトウェア使用許諾契約書」が添付されている場合は、その規定に準拠します。

© Copyright 2008 JEOL Ltd.

- 本装置、ソフトウェア、および取扱説明書は、外国為替および外国貿易法の安全保障輸出規制品に該当する場合がありますので、日本国外に持ち出すときは当社までお問い合わせください。

登録商標

- Windows は、米国マイクロソフト社の登録商標です。
- その他の各製品名は、各社の商標または登録商標です。

製造

日本電子株式会社 〒196-8558 東京都昭島市武蔵野 3-1-2
TEL (042) 543-1111
FAX (042) 546-3353
ホームページ <http://www.jeol.co.jp/>

注: 装置の修理やお問い合わせは、当社または日本電子データム㈱指定のサービス窓口にご連絡ください。

日本電子株式会社から提供するソフトウェアをご使用になる前に、必ず下記「使用許諾契約書」をお読みください。この契約書の内容にご同意いただけない場合は、ソフトウェアをご使用にならず、日本電子株式会社にご連絡ください。

ソフトウェア使用許諾契約書

本使用許諾契約書は、お客様と日本電子株式会社（以下日本電子という）との間で、日本電子が所有するソフトウェア（以下許諾ソフトウェアという）の使用権の許諾について合意するものです。

第1条（使用権）

許諾ソフトウェアの使用権とは、購入いただき日本国内に設置された日本電子製品において、お客様が許諾ソフトウェアを使用する権利をいいます。

第2条（使用許諾）

1. 日本電子はお客様に対し、許諾ソフトウェアの日本国内における非独占的かつ譲渡不能な使用権を許諾します。
2. お客様は、許諾ソフトウェアをお客様の業務遂行の目的に限定して、一台のコンピュータシステムにインストールして使用することができます。
3. お客様は、許諾ソフトウェアを再使用権の設定その他の方法で第三者に使用させること、開示すること、および、いかなる場合にも日本国外に持ち出すことはできません。

第3条（譲渡等の禁止）

1. お客様は、許諾ソフトウェアの使用権を第三者に譲渡、転貸、開示し、または占有を移転することはできません。
2. お客様は、許諾ソフトウェアの全部または一部を修正、改変、リバースエンジニアリング、逆コンパイルまたは逆アセンブルすることはできません。

第4条（複製禁止）

お客様は、許諾ソフトウェアをその全部を、若しくは一部であるかを問わず複製することはできません。

第5条（許諾ソフトウェアの権利）

許諾ソフトウェアに関する著作権等一切の権利は、日本電子に帰属します。

第6条（保証）

1. 許諾ソフトウェアをお客様が改造した場合は、正常な動作を保証しません。
2. 許諾ソフトウェアに瑕疵がないこと、お客様の特定の目的のために適切であることまたは有用であることについて保証するものではありません。

第7条（日本電子の免責）

日本電子は、許諾ソフトウェアの使用または関連して生じたお客様および第三者の損失、損害等あるいは第三者からのお客様に対する請求に対していかなる責任も負うものではありません。

第8条（秘密保持）

お客様は、本契約により日本電子から提供された許諾ソフトウェアおよび本契約の内容について秘密を保持するものとし、日本電子の事前の文書による承諾なしに、第三者に開示あるいは漏洩してはならないものとします。

第9条（有効期間）

1. 本契約は、お客様が本契約に同意頂いた日からその効力を生じ、次条に基づいて本契約が解除されない限り、有効に存続するものとします。
2. 前項の規定にかかわらず、第8条（秘密保持）の規定は有効期間終了後も存続します。

第10条（契約の解除）

お客様が下記のいずれかの事項に該当した場合には、日本電子は何等の催告なくお客様への通知により、直ちに本契約を解除することができます。なお、それによって蒙った損害を請求することができます。

- (1) 本契約条項のいずれかに違反する事由が発生したとき、
- (2) 差押え、仮差押え、仮処分、競売、破産、会社整理、会社更生手続等の申し立てまたは公租公課の滞納処分を受けたとき。

第11条（契約終了後の措置）

第9条第1項または第10条の規定により本契約が終了または解除された場合、お客様は許諾ソフトウェアを破棄し、その旨を日本電子に通知するものとします。

第12条（協議）

本契約書に定めのない事項に関しては、お客様と日本電子は信義誠実の原則に基づき、協議し解決するものとします。

以上

本書の表記と用語

■装置の修理やお問い合わせに関する用語例

当社	日本電子㈱を指しますが、当社関連会社を含めて云う場合があります。
サービス窓口	特定のサービス窓口を明示している場合を除き、当社または日本電子データム㈱指定のサービス受付窓口を指します。通常サービスの受付はコールセンタでご依頼を賜りますが、各地のサービスセンタで対応させていただく場合もあります。
納入・サービス員	サービス員の所属を特定している場合を除き、当社または当社関連会社が、その責任において派遣する納入またはサービス要員を指します。
サービスセンタ	サービスセンタの所属を特定している場合を除き、当社または日本電子データム㈱の各地に所在するサービスセンタを指します。

■表記例

◇注意◇	使用上の注意を示します。
	説明に対する注釈です。
	マニュアルの参照箇所を示します。
1, 2, 3	連続した手順で作業するときに付けます。
◆	1回の操作で、作業が終了するときに付けます。
[File]	画面上に表示されるコマンドやパラメータなどの文字は、[]で囲んで表記します。
[File]–[Exit]	コマンドをプルダウンメニューから実行するときは、メニュー名とコマンド名を「–」でつないで表します。たとえば、[File]メニューを選んで[Exit]コマンドを実行する場合は、[File]–[Exit]と表記します。
	キーボードのキーは、  で囲んで表記します。

■マウス操作の用語例

マウスポインタ	マウスに連動して動く画面上に表示される矢印型の記号のことで、メニューの項目、コマンド、パラメータなどを指定するのに使います。 状況に応じて形が変化します。
クリック	マウスの左ボタンを押して離す操作のことです。
右クリック	マウスの右ボタンを押して離す操作のことです。
ダブルクリック	マウスの左ボタンを2回続けて、すばやくクリックする動作です。
ドラッグ	マウスの左ボタンを押したままマウスを移動し、ボタンを離すまでの動作です。

■装置形式に関する表記

- JMS-K9 お使いの装置がJMS-Q1000GCの場合は、JMS-Q1000GCと読み替えてください。
- K9 お使いの装置がJMS-Q1000GCの場合は、Q1000GCと読み替えてください。

目 次

安全上の注意

使用上の注意

1 概 要

2 仕 様

2.1	定量条件設定プログラム.....	2-1
2.2	定量解析プログラム.....	2-1

3 定量条件の設定

3.1	定量条件の設定.....	3-1
3.2	試料条件の設定.....	3-2
3.2.1	データの読み込み.....	3-2
3.2.1a	定量条件ファイル(拡張子:QNS)から読み込む.....	3-2
3.2.1b	旧形式の定量条件ファイル(拡張子:QNT)から読み込む.....	3-4
3.2.1c	シーケンスファイル(拡張子:SEQ)から読み込む.....	3-4
3.2.2	データの入力.....	3-5
3.2.2a	空の新規行を追加してパラメータを入力する.....	3-5
3.2.2b	前行をリファレンスにして複数行を追加する.....	3-7
3.2.2c	Excelのテーブルからの貼り付け.....	3-7
3.2.3	データの編集.....	3-8
3.2.3a	切り取り.....	3-8
3.2.3b	コピー.....	3-8
3.2.3c	貼り付け.....	3-8
3.2.3d	行の移動.....	3-8
3.2.3e	列の移動.....	3-8
3.2.3f	ID編集.....	3-9
3.3	化合物条件の設定.....	3-12
3.3.1	データの読み込み.....	3-13
3.3.1a	定量条件ファイル(拡張子:QNS)から読み込む.....	3-13
3.3.1b	旧形式の定量条件ファイル(拡張子:QNT)から読み込む.....	3-14
3.3.2	データの入力.....	3-15
3.3.2a	空の新規行を追加してパラメータを入力する.....	3-15
3.3.2b	前行をリファレンスにして複数行を追加する.....	3-27
3.3.2c	Excelのテーブルからドラッグ&ドロップ.....	3-28
3.3.2d	定性解析プログラムからドラッグ&ドロップ.....	3-29
3.3.2e	共通データから貼り付け.....	3-30
3.3.3	データの編集.....	3-31
3.3.3a	切り取り.....	3-31
3.3.3b	コピー.....	3-31
3.3.3c	貼り付け.....	3-31
3.3.3d	ソート.....	3-31
3.3.3e	行の移動.....	3-32
3.3.3f	列の移動.....	3-32
3.3.3g	保持時間のオフセット.....	3-33

3.4	処理条件の設定	3-33
3.5	その他の機能.....	3-36
3.5.1	保存.....	3-36
3.5.2	印刷.....	3-36
3.5.2a	試料テーブルの印刷.....	3-36
3.5.2b	化合物テーブルの印刷	3-37
3.5.3	オプション設定.....	3-38
3.5.4	追加時の初期設定	3-38
3.5.4a	試料テーブルの初期値設定	3-38
3.5.4b	化合物テーブルの初期値設定.....	3-39
3.5.5	データチェック.....	3-39
3.5.6	シーケンス起動.....	3-40
4	定量解析	
4.1	定量解析.....	4-1
4.2	定量解析の方法	4-2
4.3	データの表示.....	4-3
4.3.1	化合物一覧.....	4-4
4.3.1a	定量結果の確認.....	4-4
4.3.1b	定量結果のソート.....	4-8
4.3.1c	化合物条件の確認および一部のデータの変更.....	4-8
4.3.2	試料一覧.....	4-9
4.3.2a	試料条件の確認および一部のデータの変更	4-9
4.3.2b	指定試料のTIC表示.....	4-10
4.3.2c	処理条件の確認および一部のデータの変更.....	4-11
4.3.3	定量結果一覧.....	4-11
4.3.4	検量線	4-12
4.3.4a	指定化合物の検量線表示.....	4-12
4.3.4b	検量線の変更.....	4-13
4.3.5	保持時間予測.....	4-14
4.3.5a	保持時間予測データの表示.....	4-14
4.3.5b	保持時間予測データの修正	4-14
4.3.6	システム適合性.....	4-15
4.4	グラフの表示.....	4-16
4.4.1	1検体1成分表示	4-16
4.4.1a	表示方法.....	4-16
4.4.1b	表示アイテムの選択.....	4-17
4.4.1c	表示方法の変更.....	4-17
4.4.1d	同時表示数の設定	4-19
4.4.1e	表示強度範囲の自動設定	4-20
4.4.1f	表示強度範囲の手動設定.....	4-21
4.4.1g	表示時間範囲の設定	4-22
4.4.1h	表示時間範囲の移動	4-22
4.4.1i	面積設定(データ間を結ぶ)	4-23
4.4.1j	面積設定(任意点間を結ぶ)	4-25
4.4.1k	スペクトル表示設定.....	4-26
4.4.1l	表示色設定.....	4-26
4.4.1m	クリップボードへコピー.....	4-27
4.4.2	複数検体1成分表示	4-28

4.4.2a	表示方法	4-28
4.4.2b	表示方法の変更	4-30
4.4.2c	同時表示数の設定	4-30
4.4.2d	表示強度範囲の自動設定	4-31
4.4.2e	表示強度範囲の手動設定	4-32
4.4.2f	表示時間範囲の設定	4-32
4.4.2g	表示時間範囲の移動	4-33
4.4.2h	面積設定(データ間を結ぶ)	4-33
4.4.2i	面積設定(任意点間を結ぶ)	4-35
4.4.2j	クリップボードへコピー	4-36
4.4.3	1検体複数成分表示	4-36
4.4.3a	表示方法	4-36
4.4.3b	表示方法の変更	4-38
4.4.3c	同時表示数の設定	4-38
4.4.3d	表示強度範囲の自動設定	4-39
4.4.3e	表示強度範囲の手動設定	4-40
4.4.3f	表示時間範囲の設定	4-40
4.4.3g	表示時間範囲の移動	4-41
4.4.3h	スペクトル表示設定	4-41
4.4.3i	クリップボードへコピー	4-42
4.5	オプション設定	4-42
4.5.1	基本設定	4-42
4.5.2	化合物一覧	4-43
4.5.3	試料一覧	4-44
4.5.4	検量線表示	4-44
4.5.5	クロマトグラム表示	4-46
4.5.6	クロマトグラム表示(複数検体)	4-47
4.5.7	クロマトグラム表示(複数成分)	4-49
4.5.8	スペクトル表示	4-51
4.6	その他の機能	4-52
4.6.1	保存	4-52
4.6.1a	上書き保存	4-52
4.6.1b	名前を付けて保存	4-52
4.6.1c	保持時間更新ファイルの作成	4-53
4.6.2	印刷	4-54
4.6.2a	印刷	4-54
4.6.2b	フォーマットを指定して印刷	4-54
4.6.2c	印刷設定(化合物毎)	4-58
4.6.3	コピー	4-59
4.6.4	検索	4-59
4.6.5	化合物スライドショー	4-60
4.6.6	プログラムの終了	4-60
5	分析結果報告書	
5.1	マスターデータの登録	5-1
5.2	テンプレートの登録	5-2
6	その他のプログラム	
6.1	メインプログラム	6-1
6.1.1	メインプログラムの起動	6-1

6.1.2	Q1000GC各プログラムの起動.....	6-2
6.1.3	起動アイコンの編集.....	6-2
6.1.3a	起動アイコンの登録.....	6-2
6.1.3b	起動アイコンの削除.....	6-3
6.1.3c	起動アイコンの名称の変更.....	6-3
6.1.4	環境設定.....	6-3
6.1.5	メンテナンスモニタ.....	6-4
6.1.6	装置ステータスの表示.....	6-5
6.1.7	バージョン情報.....	6-5
6.2	ファイルメンテナンス.....	6-6
6.2.1	ファイルメンテナンスプログラムの起動.....	6-6
6.2.2	フォルダの操作.....	6-7
6.2.2a	フォルダの作成.....	6-7
6.2.3	ファイルの操作.....	6-7
6.2.3a	ファイル名の表示.....	6-7
6.2.3b	ファイル表示種別設定.....	6-7
6.2.3c	表示方法の設定.....	6-8
6.2.3d	詳細表示の設定.....	6-9
6.2.4	データファイルのプレビュー.....	6-10
6.2.5	コメントの編集.....	6-11
6.2.6	ファイルの圧縮.....	6-11
6.3	定性解析プログラムの変更点.....	6-12
6.3.1	変更の概要.....	6-12
6.3.2	クロマトのラベリング.....	6-13
6.3.3	ライブラリサーチのオプション設定.....	6-15
6.3.4	ライブラリサーチの化合物名転記.....	6-15
6.3.5	リバーササーチ.....	6-16
6.3.6	クロマトのベースラインカット.....	6-18
6.3.7	マルチスペクトル表示.....	6-18
6.3.8	スペクトルのベースライン位置設定.....	6-19
6.3.9	スペクトルのベースラインカット.....	6-19
6.3.9a	レベルカット.....	6-19
6.3.9b	ピークカット.....	6-20
6.3.10	スペクトルページの自動スクロール.....	6-21
6.3.11	スペクトルのCl,Br含有個数サーチ.....	6-21
6.3.12	シーケンス印刷設定.....	6-21
6.3.13	保持時間とI/Q比によるサーチ.....	6-23
6.4	シーケンス.....	6-25
6.4.1	シーケンスプログラムの起動.....	6-25
6.4.2	シーケンスの作成方法.....	6-26
6.4.3	シーケンステーブルでの編集.....	6-28
6.4.3a	追加.....	6-28
6.4.3b	コピー条件設定.....	6-29
6.4.3c	削除.....	6-29
6.4.3d	挿入.....	6-30
6.4.3e	切り取り.....	6-30
6.4.3f	コピー.....	6-31
6.4.3g	貼り付け(上書き).....	6-31

6.4.3h	貼り付け(挿入).....	6-32
6.4.4	シーケンス処理.....	6-32
6.4.4a	シーケンス開始.....	6-32
6.4.4b	シーケンス停止.....	6-33
6.4.4c	測定中止.....	6-33
6.4.4d	測定終了.....	6-33
6.4.5	測定.....	6-33
6.4.6	他のプログラムの起動.....	6-35
6.4.6a	チューニングプログラムの起動.....	6-35
6.4.6b	条件設定プログラムの起動.....	6-35
6.4.6c	定量条件設定プログラムの起動.....	6-35
6.4.7	その他の機能.....	6-36
6.4.7a	新規作成.....	6-36
6.4.7b	シーケンスファイルの読み込み.....	6-36
6.4.7c	シーケンスファイルの保存.....	6-36
6.4.7d	印刷.....	6-37
6.4.7e	履歴の表示.....	6-37
6.4.7f	整列.....	6-37
6.5	基準辞書のメンテナンス.....	6-38
6.5.1	基準辞書の編集.....	6-39
6.5.1a	基準辞書編集プログラムの起動.....	6-39
6.5.1b	基準辞書の新規登録.....	6-39
6.5.1c	基準辞書の削除.....	6-40
6.5.1d	基準辞書の編集.....	6-40
6.5.2	基準値データベース作成.....	6-42
6.5.2a	基準値データベース作成プログラムの起動.....	6-42
6.5.2b	基準値データベースの作成.....	6-42
6.5.2c	基準値データベースのバックアップ.....	6-43

安全上の注意

本装置には、使用者や装置自身を事故の発生による傷害や危害、損傷を防ぐ、安全機構が組み込まれていますが、装置の意図する使用目的および使用方法を逸脱して使用した場合、安全装置の機能がそこなわれる場合があります。装置を扱う前には、この取扱説明書を必ずお読みになり、記載されている内容をよく理解した上で、正しくお使いください。また、この「安全上の注意」には、安全に関する重要な内容が記載されています。

警告表示の方法については、危険の程度により、以下に示すような分類を行っています。

	危険：	取り扱いを誤った場合に、使用者が死亡または重傷を負う危険の状態が生じることが想定され、かつ危険発生時の警告の緊急性が高い限定的な場合。
	警告：	取り扱いを誤った場合に、使用者が死亡または重傷を負う危険の状態が生じることが想定される場合。
	注意：	取り扱いを誤った場合に、使用者が軽傷を負うか、または物的損害のみが発生する危険の状態が生じることが想定される場合。

この装置の危険な部分には、警告表示に以下のようなシンボルマーク（絵表示）を付記したラベルが貼られています。これらの場所には手などを触れないでください。



- 
 - 装置は、カタログや取扱説明書に記載されている、使用目的や使用方法の範囲内で正しくお使いください。
- 
 - 工具（含む「鍵」）を使わないと外せない部品や防護用部品（外装パネル）の取り外し、および取扱説明書で指定した以外の、ケーブルやコネクタは取り外さないでください。
- 
 - 取扱説明書に記載されている以外の分解／組立作業は行わないでください。作業は専門知識が必要なので、サービス窓口にご相談ください。
- 
 - 安全装置の解除および代替品の取り付けなどを含め、装置を改造しないでください。
- 
 - 感電の危険がありますので、保護接地（アース）線の取り外しや、所定の場所からは移動しないでください。
- 
 - 装置の架台やテーブルなどには乗らないでください。
- 
 - 装置や廃液などを廃棄処分する場合には、関係する法律や規則に則って、環境を汚さない適切な方法で処理してください。
- 
 - この装置に付加または組み込まれている付属装置については、それぞれの取扱説明書の「安全上の注意」を必ずお読みください。
- 
 - 装置の異常や不明な点がございましたら、当社または日本電子データム㈱指定のサービス窓口にお問い合わせください。

製品納入時の注意



- 製品納入時の初期据え付け/取り付けおよび調整は、当社サービスセンタより技術者が出向いて作業を行います。また、弊社が他社から調達して納入する商品は、基本的には製造元の専門家と、サービスセンタより納入員が出向いて作業を行います。お客様ご自身での作業は行わないでください。

注意



- 装置の稼働時には検出器に触れないでください。
透過電子 (STEM) 検出器の挿入・引き出しは空圧駆動で行われます。検出器が偶発的に予告無く動作した場合、像検出室と検出器の間に手を挟まれて怪我をする恐れがあります。

使用上の注意

ここでは, 装置自身の損傷につながる, 重要な注意を記載します。

- WindowsXP Professionalの機能である, 簡易ユーザ切り替えおよびリモートデスクトップは使用しないでください。

1

概 要

目 次

本プログラムは、JMS-Q1000GCシリーズMSシステム上で得られたデータを用い、あらかじめ登録された定量条件を使用して、定量解析を行うためのアプリケーションプログラムです。定量結果は画面に表示すると共にファイルに記録されます。

定量結果は、あらかじめ登録されたフォーマットにより、報告書として印刷することができます。

本プログラムは、JMS-Q1000GCシリーズMSのPCシステム上にインストールして使用します。

2

仕 様

2.1	定量条件設定プログラム.....	2-1
2.2	定量解析プログラム	2-1

2.1 定量条件設定プログラム

登録試料数:	最大500
登録化合物数:	最大1000
試料条件の編集:	可能
化合物条件の編集:	可能
処理条件の編集:	可能
定量条件のクリップボードへのコピー:	可能
定量条件の印刷:	可能
シーケンスプログラムの起動:	可能

2.2 定量解析プログラム

一括処理試料数:	最大500
登録化合物数:	最大1000
確認イオンの設定数:	最大4
定量方法:	絶対検量線法, 相対検量線法
濃度単位:	mg/L, μ g/L, ng/L, ppm, ppb, ppt, %
検量線の再利用:	可能
他の化合物の検量線利用:	可能
添加回収試験:	可能
積分方法:	接線, 自動, 固定範囲
ピーク同定方法:	保持時間, IQ比, スペクトル類似度
N.D.判定:	定量下限, 検出下限, 基準値, ユーザ設定値
信頼性評価項目:	保持時間, IQ比, スペクトル類似度
信頼性評価レベル:	5段階
基準値判定:	5段階
基準辞書:	上水, 食品農薬
ブランク補正:	可能
n-アルカンによる保持時間の補正:	可能
スムージング処理:	0~99回 (3点の移動平均)
希釈倍率:	設定可能
定量条件の修正および再定量:	可能
保持時間補正データの保存:	
定量イオンと参照イオンのクロマトグラム表示:	並べて表示, 重ねて表示 1検体1成分, 複数検体1成分, 1検体複数成分
クロマトグラム表示範囲の変更:	X軸, Y軸共に可能

クロマトグラム面積再設定:	可能
クロマトグラム自動送り表示:	可能
クロマトグラムのクリップボードへのコピー:	可能
クロマトグラムピークのスペクトル表示:	可能
ライブラリのスペクトル表示:	可能
検量線の表示:	可能
内標変動グラフ表示:	可能
化合物条件の表示:	可能
試料条件の表示:	可能
定量結果一覧の表示:	可能
表示項目の指定:	可能
一覧表のクリップボードへのコピー:	可能
登録されたフォーマットでの報告書作成:	可能



定量条件の設定

3.1	定量条件の設定	3-1
3.2	試料条件の設定	3-2
3.2.1	データの読み込み	3-2
3.2.1a	定量条件ファイル(拡張子:QNS)から読み込む	3-2
3.2.1b	旧形式の定量条件ファイル(拡張子:QNT)から読み込む	3-4
3.2.1c	シーケンスファイル(拡張子:SEQ)から読み込む	3-4
3.2.2	データの入力	3-5
3.2.2a	空の新規行を追加してパラメータを入力する	3-5
3.2.2b	前行をリファレンスにして複数行を追加する	3-7
3.2.2c	Excelのテーブルからの貼り付け	3-7
3.2.3	データの編集	3-8
3.2.3a	切り取り	3-8
3.2.3b	コピー	3-8
3.2.3c	貼り付け	3-8
3.2.3d	行の移動	3-8
3.2.3e	列の移動	3-8
3.2.3f	ID編集	3-9
3.3	化合物条件の設定	3-12
3.3.1	データの読み込み	3-13
3.3.1a	定量条件ファイル(拡張子:QNS)から読み込む	3-13
3.3.1b	旧形式の定量条件ファイル(拡張子:QNT)から読み込む	3-14
3.3.2	データの入力	3-15
3.3.2a	空の新規行を追加してパラメータを入力する	3-15
3.3.2b	前行をリファレンスにして複数行を追加する	3-28
3.3.2c	Excelのテーブルからドラッグ&ドロップ	3-28
3.3.2d	定性解析プログラムからドラッグ&ドロップ	3-30

3.3.2e	共通データから貼り付け	3-31
3.3.3	データの編集.....	3-31
3.3.3a	切り取り.....	3-31
3.3.3b	コピー	3-31
3.3.3c	貼り付け	3-32
3.3.3d	ソート.....	3-32
3.3.3e	行の移動.....	3-33
3.3.3f	列の移動.....	3-33
3.3.3g	保持時間のオフセット.....	3-33
3.4	処理条件の設定.....	3-34
3.5	その他の機能.....	3-37
3.5.1	保存.....	3-37
3.5.2	印刷.....	3-37
3.5.2a	試料テーブルの印刷.....	3-37
3.5.2b	化合物テーブルの印刷	3-38
3.5.3	オプション設定	3-38
3.5.4	追加時の初期設定	3-39
3.5.4a	試料テーブルの初期値設定.....	3-39
3.5.4b	化合物テーブルの初期値設定.....	3-39
3.5.5	データチェック.....	3-40
3.5.6	シーケンス起動.....	3-40

3.1 定量条件の設定

定量解析を行う前に、定量条件を設定して定量条件ファイルに記録しておきます。

定量条件の設定は、定量条件設定プログラムで行います。

- ◆ Q1000GCメインプログラム画面の「Q1000GCアプリケーション」アイコングループ内、「定量条件設定」アイコン(図3.1)をダブルクリックする。



図3.1

定量条件設定プログラムの初期画面が表示されます(図3.2)。

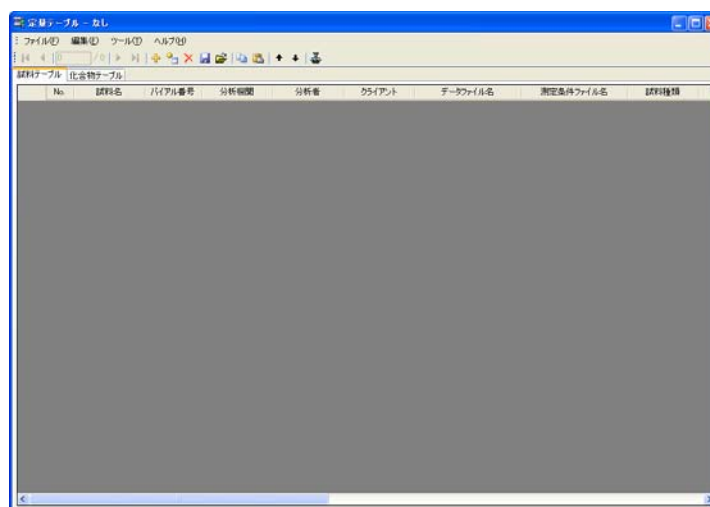


図3.2

定量条件は、試料条件、化合物条件、処理条件の3種類に分けられます。

試料条件の設定は、試料テーブルタブ(図3.3)をクリックしてから行います。

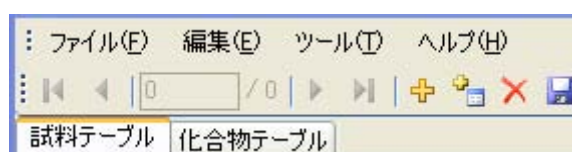


図3.3

定量条件の設定は、化合物テーブルタブ(図3.3)をクリックしてから行います。
 処理条件の設定は、メニューの[ツール(T)]-[処理条件(P)]をクリックするとオープンする処理条件画面で行います。
 ツールバーには以下に示す機能が割り当てられています。

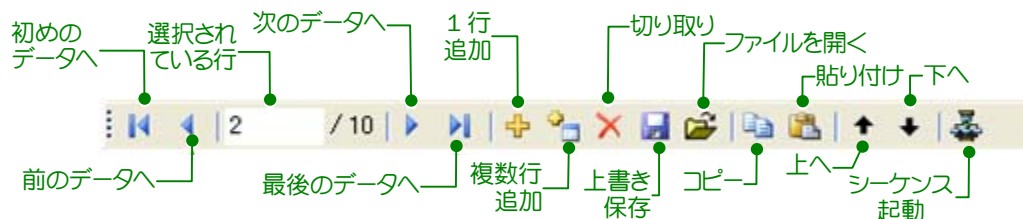


図3.4

3.2 試料条件の設定

試料条件には、定量を行う試料のパラメータを設定します。試料条件は、試料テーブルで設定します。

3.2.1 データの読み込み

以前作成した定量条件ファイルや旧形式の定量条件ファイルから試料条件を読み込むことができます。またシーケンスファイルからも試料条件を読み込むことができます。

3.2.1a 定量条件ファイル(拡張子:QNS)から読み込む

以前作成した定量条件ファイルを読み込み、必要に応じて修正して使用します。
 定量条件ファイルはすべて読み込むか、試料条件だけ読み込むか、化合物条件だけ読み込むかを選択できます。

1. メニューの[ファイル(F)]-[開く(O)]をクリックする。
 ファイル選択コモンダイアログ画面が表示されます(図3.5)。

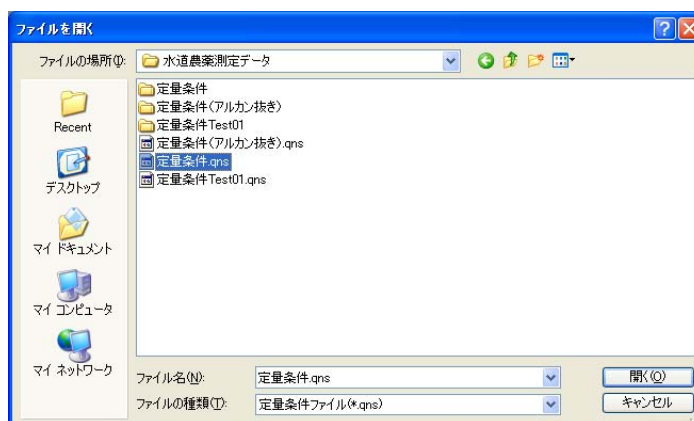


図3.5

目次

2. 読み込むファイルのフォルダおよびファイル名を選択し、[開く]ボタンをクリックする。

データ選択画面が表示されます(図3.6)。

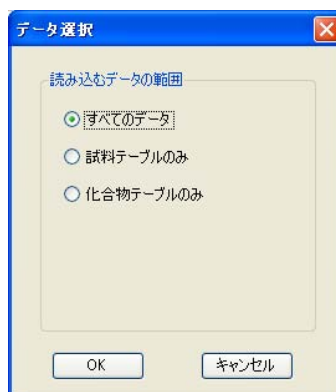


図3.6

3. データ選択画面で、「すべてのデータ」または「試料テーブルのみ」を選択して[OK]ボタンをクリックする。

試料テーブルにデータが読み込まれます(図3.7)。

定量テーブル C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns								
ファイルE 編集E ツールD ヘルプH								
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28								
試料テーブル 化合物テーブル								
No	試料名	バイアル番号	分析根拠ID	分析者ID	クライアントID	データファイル	測定条件ファイル	試料種類
1		002	00001	00000002	#A0001.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
2		002	00001	00000002	#A0002.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
3		002	00001	00000002	#A0003.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
4		002	00001	00000002	#A0004.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
5		002	00001	00000002	#A0005.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
6		002	00001	00000002	#A0006.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
7		002	00001	00000002	#A0007.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
8		002	00001	00000002	#A0008.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
9		002	00001	00000002	#A0009.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
10		002	00001	00000002	#A0010.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
11		002	00001	00000002	#A0011.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
12		002	00001	00000002	#A0012.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
13		002	00001	00000002	#A0013.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
14		002	00001	00000002	#A0014.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
15		002	00001	00000002	#A0015.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
16		002	00001	00000002	#A0016.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
17		002	00001	00000002	#A0017.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
18		002	00001	00000002	#A0018.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
19		002	00001	00000002	#A0019.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
20		002	00001	00000002	#A0020.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
21		002	00001	00000002	#A0021.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
22		002	00001	00000002	#A0022.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
23		002	00001	00000002	#A0023.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
24		002	00001	00000002	#A0024.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
25		002	00001	00000002	#A0025.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
26		002	00001	00000002	#A0026.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
27		002	00001	00000002	#A0027.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料
28		002	00001	00000002	#A0028.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	C:\NovaSpec_Data\2008.01.10.データ\2007.12.19.条件\定量条件.qns	標準試料

図3.7

 データ選択画面で「すべてのデータ」を指定しますと、化合物条件や処理条件も読み込まれます。

3.2.1b 旧形式の定量条件ファイル(拡張子:QNT)から読み込む

旧定量解析プログラムで使用した形式のファイルを変換して読み込みます。

 旧定量解析プログラムとはMS-66010MPRメインプログラムまたはEQ-16030MPRメインプログラムに含まれる定量プログラムのことを指します。

1. メニューの[ファイル(F)]-[インポート(I)]をクリックする。

ファイル選択コモンダイアログ画面が表示されます(図3.8)。

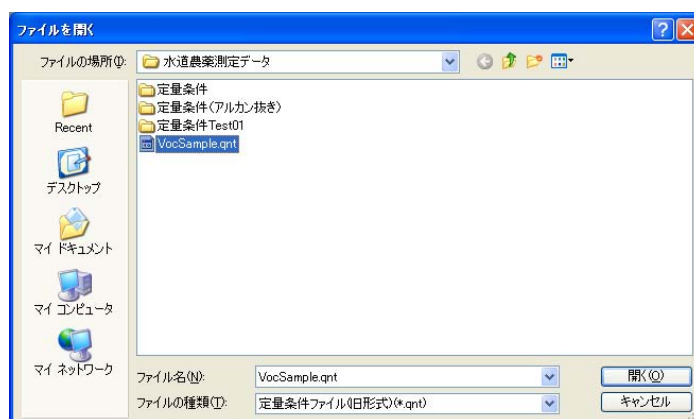


図3.8

2. ファイルの種類で「定量条件ファイル(旧形式)(*.qnt)」を選択する。
3. 読み込むファイルのフォルダおよびファイル名を選択し、[開く]ボタンをクリックする。

データ選択画面が表示されます(図3.6)。

4. データ選択画面で、「すべてのデータ」または「試料テーブルのみ」を選択して[OK]ボタンをクリックする。

試料テーブルにデータが読み込まれます(図3.7)。

 データ選択画面で「すべてのデータ」を指定しますと、化合物条件や処理条件も読み込まれます。

 濃度関連のデータは読み込まれません。

3.2.1c シーケンスファイル(拡張子:SEQ)から読み込む

シーケンスファイル内で処理項目が「測定」の行を試料条件に読み込みます。

1. メニューの[ファイル(F)]-[インポート(I)]をクリックする。
ファイル選択コモンダイアログ画面が表示されます(図3.8)。
2. ファイルの種類で「シーケンスファイル(*.seq)」を選択する。
3. 読み込むファイルのフォルダおよびファイル名を選択し、[開く]ボタンをクリックする。
データ選択画面が表示されます(図3.6)。
4. データ選択画面で、「すべてのデータ」または「試料テーブルのみ」を選択して[OK]ボタンをクリックする。
試料テーブルにデータが読み込まれます(図3.7)。

3.2.2 データの入力

試料テーブルへのパラメータの入力は以下のような方法があります。

3.2.2a 空の新規行を追加してパラメータを入力する

1. 試料テーブルタブ(図3.3)をクリックする。
試料テーブルが表示されます。
2. ツールバーの新規追加ボタンをクリックする。
新規の空行が1行追加されます。
試料テーブルに入力するパラメータを以下に示します。

試料名: 任意の試料名を入力します。

バイアル番号: Agilent7683オートサンプラを使用して測定を行う場合のバイアル番号を入力します。

分析機関ID: 報告書に付ける分析機関IDをデータベースから選択し設定します。

分析者ID: 報告書に付ける分析者IDをデータベースから選択し設定します。

クライアントID: 報告書に付けるクライアントIDをデータベースから選択し設定します。

データファイル名: 測定データファイル名を指定します。データファイルは処理条件の「測定フォルダ」に指定されたフォルダに保存されます。データファイル名は拡張子を入力する必要はありません。
測定済のデータを登録する場合は、項目をダブルクリックします。「測定フォルダ」に保存されている測定結果ファイルの一覧が表示されます。

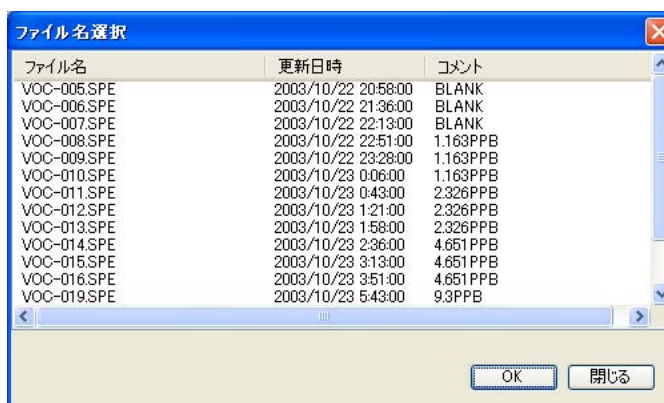


図3.9

ファイル名をダブルクリックするかファイル名を選択して[OK]ボタンをクリックすると指定したファイル名が読み込まれます。同時にコメントも読み込まれます。同じ操作を続けて行くと、連続した行に読み込むことができます。「閉じる」ボタンで一覧が閉じます。

測定条件ファイル名:	測定条件ファイル名をフルパスで指定します。測定条件ファイルは測定を行う際のGCおよびMSの条件を記述するファイルで、あらかじめ条件設定プログラムで設定しておきます。 各行の測定条件ファイル名をクリックすることにより、ファイル名選択ダイアログが表示されるので、該当する測定条件ファイルを選択します。
試料種類:	以下の試料種類から選択します。 標準試料: 相対検量線法で定量を行うときの、検量線を作成するための標準試料。 定量試料: 定量を行う試料。 添加回収: 添加回収試験を行う試料。添加回収試料では、回収率が計算されます。回収率の計算は、直前の試料(標準試料または定量試料)の間でのみ行います。 n-アルカン: 保持時間補正用n-アルカン混合試料。試料条件で「n-アルカン」以降に記述された試料の保持時間を補正します。 性能テスト: 性能テストを行うための試料。
標準濃度:	標準試料の濃度を設定します。濃度は濃度値を直接入力するのではなく、あらかじめ化合物テーブルで設定した濃度IDを選択します。
添加回収濃度:	添加回収試験時の添加濃度を設定します。添加回収濃度は濃度値を直接入力するのではなく、あらかじめ化合物テーブルで設定した濃度IDを選択します。
内標濃度:	相対検量線法選択時の内標化合物の濃度を設定します。内標濃度は濃度値を直接入力するのではなく、あらかじめ化合物テーブルで設定した濃度IDを選択します。
グループ名:	統計計算を行うためのグループ名を設定します。同じグループ名の試料の統計計算(平均値, 標準偏差, 変動係数)を行います。
測定コメント:	測定ファイルに記録する測定コメントを入力します。
基準辞書名:	定量に使用する基準値テーブルを指定します。出荷時、以下の基準辞書がインストールされています。 上水: 食品農薬:
分類名:	基準辞書名で「食品農薬」を選択したときの食品分類を選択します。
ブランク:	ブランク試料として定量値を差し引く試料番号を選択します。
希釈率:	サンプルが希釈(あるいは濃縮)されている際に、希釈(濃縮)前の定量値を算出するためのパラメータ。単純に定量値に掛け合わせるだけの数値です。
印刷:	定量時、試料を印刷するか否かを設定します。
印刷コメントID	報告書に付ける印刷コメントIDをデータベースから選択し設定します。

3.2.2b 前行をリファレンスにして複数行を追加する

1. 試料テーブルタブ(図3.3)をクリックする。
試料テーブルが表示されます。
2. ツールバーの複数行追加ボタンをクリックする。
複数行追加設定画面が表示されます。

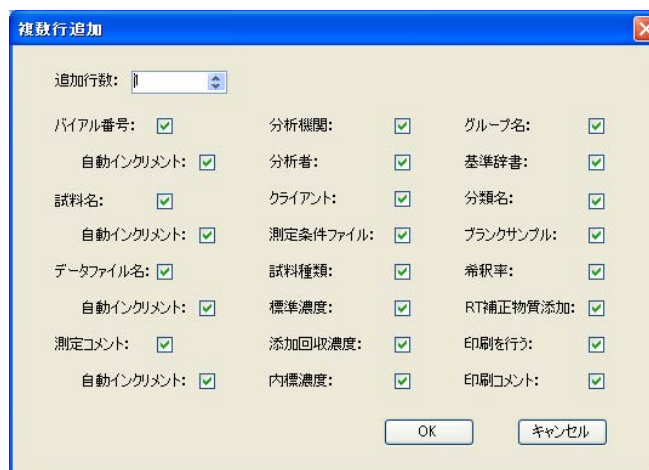


図3.10

複数行追加画面では追加行数設定, 最終行からコピーする試料テーブルの項目名の選択および最終行からインクリメントするかの設定を行います。

3. [OK]ボタンをクリックする。
指定行数が追加されます。

3.2.2c Excelのテーブルからの貼り付け

1. 試料テーブルタブ(図3.3)をクリックする。
試料テーブルが表示されます。
2. コピー元のExcelテーブルを開き, コピーする行を選択し, クリップボードにコピーする。
複数行の選択が可能です。
コピー元テーブルの列は以下の並びである必要があります。
No., バイアル番号, 測定条件ファイル名, 試料種類, 標準濃度, 添加回収濃度, 内標濃度, グループ名, 測定コメント, 基準辞書名, 分類名, ブランク, 希釈率, 印刷, 印刷コメント
3. 試料テーブルで, Excelから貼り付ける行数分, 空行を追加し, 選択状態にする。
4. メニューの[編集(E)]-[貼り付け(P)]をクリックする。
Excelの指定したテーブルが貼り付きます。

3.2.3 データの編集

3.2.3a 切り取り

1. 試料テーブルで、切り取る項目を選択する。
マウスの左ボタンを押しながらドラッグすることにより、複数項目の選択ができます。また試料テーブルの1列目(グレーの部分)をマウスでクリックすることにより、行選択ができます。
2. メニューの[編集(E)]-[切り取り(I)]またはツールバーの切り取りボタンをクリックする。
選択された項目の内容が削除されます。
行選択されたデータは、内容と行が削除されます。

3.2.3b コピー

1. 試料テーブルで、コピーするセルを選択する。
マウスの左ボタンを押しながらドラッグすることにより、複数セルの選択ができます。また試料テーブルの1列目(グレーの部分)をマウスでクリックすることにより、行選択ができます。
2. メニューの[編集(E)]-[コピー(C)]またはツールバーの[コピー]ボタンをクリックする。
選択された項目の内容がクリップボードへコピーされます。列区切りはTABになります。

3.2.3c 貼り付け

1. あらかじめクリップボードにデータをコピーしておく。
2. クリップボードのデータを貼り付ける、試料テーブルのセルを選択する。
マウスの左ボタンを押しながらドラッグすることにより、複数セルの選択ができます。
試料テーブルの1列目(グレーの部分)をマウスでクリックすることにより、行選択ができます。
3. メニューの[編集(E)]-[貼り付け(P)]またはツールバーの[貼り付け]ボタンをクリックする。
選択されているセルに、クリップボードの内容が貼り付けられます。

3.2.3d 行の移動

1. 試料テーブルの移動させたい行を、行選択する。
行選択は、化合物テーブルの1列目をクリックします。
2. ツールバーの[上へ移動]ボタンまたは[下へ移動]ボタンをクリックする。
選択した行が上の行または下の行と入れ替わります。

3.2.3e 列の移動

- ◆ 試料テーブルの移動させたい列ヘッダーをクリックし、そのままドラッグして移動させたい位置で離す。
テーブルの移動させたい列ヘッダーでクリックしたままでドラッグすると、下図のように指定した項目の枠が表示されます。

目次

試料テーブル		化合物テーブル		
No.	データファイル	測定条件ファイル	試料種類	標準濃度
1	#A0001.SPE	C:\NovaSpec_Data\2008.0...	標準試料	STD01
2	#A0002.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.0...	標準試料	STD01
3	#A0003.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.0...	標準試料	STD01
4	#A0004.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.0...	標準試料	STD01
5	#A0005.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.0...	標準試料	STD01
6	#A0006.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.0...	標準試料	STD02
7	#A0007.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.0...	標準試料	STD02
8	#A0008.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.0...	標準試料	STD02
9	#A0009.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.0...	標準試料	STD02
10	#A0010.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.0...	標準試料	STD02
11	#A0011.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.0...	標準試料	STD03
12	#A0012.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.0...	標準試料	STD03
13	#A0013.spe	C:\NovaSpec_Data\2008.0...	標準試料	STD03

図3.11

3.2.3f ID編集

試料テーブルの項目のうち、分析機関ID、分析者ID、クライアントID、印刷コメントIDは、直接の入力はできません。以下の手順により行います。

1. 分析機関、分析者、クライアント、印刷コメントを設定する試料を行選択する。
複数行の選択も可能です。
2. メニューの[編集(E)]-[ID編集(I)]をクリックする。
印刷情報の設定画面が表示されます。

図3.12

3. 各項目の設定を行い[OK]ボタンをクリックする。
設定された各IDが試料テーブルに取り込まれます。
各項目の設定方法は以下の通りです。
 - a. 各項目右の[...]ボタンをクリックする。
項目毎に選択画面が表示されます。

分析機関の選択時は下記の画面が表示されます。

The screenshot shows a Windows-style dialog box titled "分析機関の選択" (Analysis Institution Selection). It contains a list of institutions with "日本電子エンジニアリング株式会社" (JEOL Engineering Co., Ltd.) selected. To the right is a placeholder for a company logo. Below the list are input fields for postal code, address, phone, fax, department, email, and URL. At the bottom are fields for registration date, update date, and updater, along with "OK" and "キャンセル" (Cancel) buttons.

会社名:	日本電子エンジニアリング株式会社	会社ロゴ
郵便番号:	196-8558	
住所:	東京都昭島市武蔵野3-1-2	
電話番号:	045-542-2879	
FAX:	045-544-6919	
部署:	技術部	
メールアドレス:		
URL:	http://www.jeol.co.jp/	
捺印タイトル1:		
捺印タイトル2:		
備考:		
登録日:	2007/09/18 13:19:03	
更新日:	2008/01/24 10:52:05	
更新者:	kitazawa	

図3.13

分析者の選択時は下記の画面が表示されます。

The screenshot shows a Windows-style dialog box titled "分析者の選択" (Analyst Selection). It contains a list of analysts with "山田 太郎" (Yamada Taro) selected. Below the list are input fields for department, position, and a memo. At the bottom are fields for registration date, update date, and updater, along with "OK" and "キャンセル" (Cancel) buttons.

分析者:	山田 太郎 田中博一 北澤佳一
部署:	技術部
役職:	主任
備考:	
登録日:	2007/02/24 09:31:11
更新日:	2008/01/24 10:53:08
更新者:	miyoshi

図3.14

クライアントの選択時は下記の画面が表示されます。

図3.15

定型コメントの選択時は下記の画面が表示されます。

図3.16

- b. 各項目の選択画面で登録データを選択し, [OK]ボタンをクリックする。
選択データが印刷情報設定画面に取り込まれます。

3.3 化合物条件の設定

定量を行う化合物のパラメータを設定します。化合物条件は、化合物テーブルで設定します。化合物テーブルは化合物テーブルタブ(図3.3)をクリックすることにより表示されます。化合物テーブルを下図に示します。下図の「テーブル表示」で選択された化合物の詳細データを、「詳細表示」に表示します。

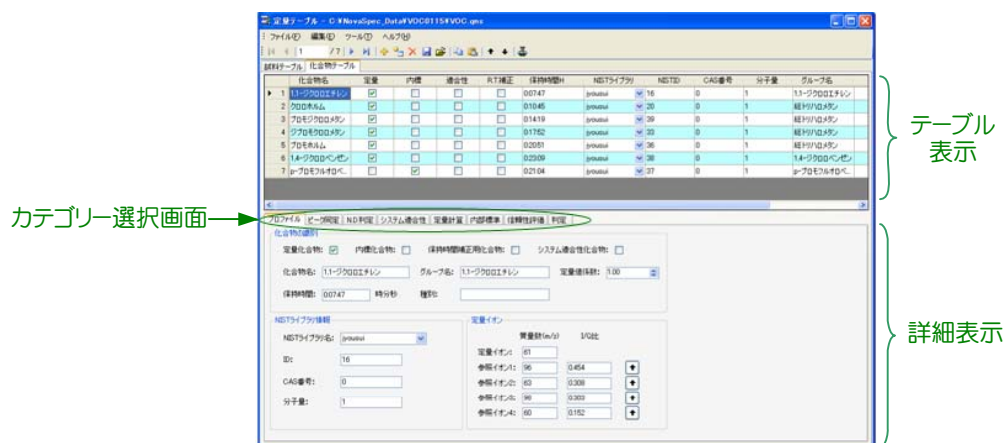


図3.17

化合物テーブルのパラメータは以下の8つのカテゴリーに分けられます。

- プロファイル: 化合物固有のパラメータ
- ピーク同定: ピーク検出, 面積計算等のパラメータ
- N.D.判定: N.D.とする条件等のパラメータ
- システム適合性: カラムパフォーマンス等の算出をするためのパラメータ(システム適合性化合物でのみ設定が必要)
- 定量計算: 定量値の算出に関するパラメータ
- 内部標準: 内部標準物質に関するパラメータ(内標化合物でのみ設定が必要)
- 信頼性評価: 信頼性評価に関するパラメータ
- 判定: 基準値判定に関するパラメータ

上記8つのカテゴリーの内、ピーク同定、N.D.判定、定量計算、内部標準、信頼性評価、判定には個別データと共通データが存在します。プロファイルとシステム適合性には個別データしかありません。個別データとは化合物毎に設定するデータで、共通データとは化合物共通で設定するデータです。ピーク同定、N.D.判定、定量計算、内部標準、信頼性評価、判定については、個別データと共通データを切り替えることができます。例えばピーク同定関連のパラメータを、化合物条件に登録してあるすべての化合物で共通にしたい場合は、ピーク同定タブで、「すべての化合物で同じ値を使用する」のチェックを付けます。ピーク同定関連のパラメータとして、共通データを使用します。反対にピーク同定関連のパラメータを、化合物個別に設定したい場合は、「すべての化合物で同じ値を使用する」のチェックを外します。この場合、ピーク同定関連のパラメータは化合物毎に設定しなければなりません。



図3.18

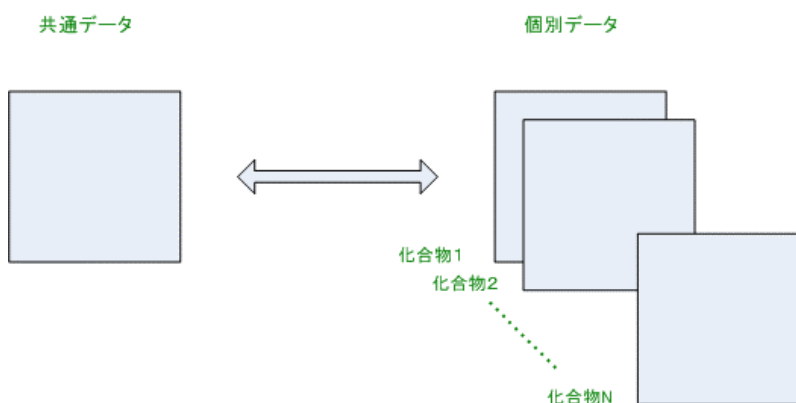


図3.19

3.3.1 データの読み込み

以前作成した定量条件ファイルや旧形式の定量条件ファイルから化合物条件を読み込むことができます。

3.3.1a 定量条件ファイル(拡張子:QNS)から読み込む

以前作成した定量条件ファイルを読み込み、必要に応じて修正して使用します。
定量条件ファイルはすべて読み込むか、試料条件だけ読み込むか、化合物条件だけ読み込むか選択できます。

1. メニューの[ファイル(F)]-[開く(O)]をクリックする。
ファイル選択コマンドダイアログ画面が表示されます(図3.5)。
2. 読み込むファイルのフォルダおよびファイル名を選択し、[開く]ボタンをクリックする。
データ選択画面が表示されます(図3.20)。

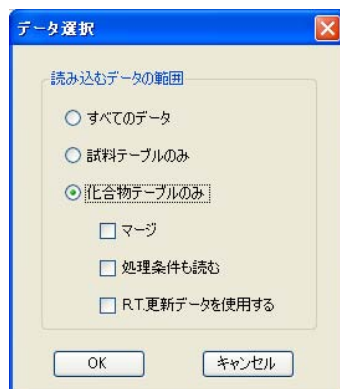


図3.20

3. データ選択画面で、「すべてのデータ」または「化合物テーブルのみ」を選択して[OK]ボタンをクリックする。

化合物テーブルにデータが読み込まれます(図3.17)。

「化合物テーブルのみ」を選択したときは、以下に示す3種類のオプションを指定できます。

マージ: チェックを付けると、すでに登録されている化合物条件の末尾に、ファイルから読み込んでデータをマージします。チェックが付いていない場合は、化合物条件をクリアしてからファイルのデータを読み込みます。

処理条件も読む: チェックを付けると、処理条件も同時に読み込みます。

R.T.更新データを使用する: 読み込む条件ファイルに「n-アルカン」試料が登録されていて、すでに定量処理が行われている場合、n-アルカンで補正された保持時間が保存されています。このチェックを付けると、補正後の保持時間が読み込まれます。

3.3.1b 旧形式の定量条件ファイル(拡張子:QNT)から読み込む

旧定量解析プログラムで使用した形式のファイルを変換して読み込みます。

旧定量解析プログラムとはMS-66010MPRメインプログラムまたはEQ-16030MPRメインプログラムに含まれる定量プログラムのことを指します。

1. メニューの[ファイル(F)]-[インポート(I)]をクリックする。
ファイル選択コモンダイアログ画面が表示されます(図3.8)。
2. ファイルの種類で「定量条件ファイル(旧形式)(*.qnt)」を選択する。
3. 読み込むファイルのフォルダおよびファイル名を選択し、[開く]ボタンをクリックする。
データ選択画面が表示されます(図3.20)。
4. データ選択画面で、「すべてのデータ」または「化合物テーブルのみ」を選択して[OK]ボタンをクリックする。

化合物テーブルにデータが読み込まれます(図3.17)。

濃度関連のデータは読み込まれません。

3.3.2 データの入力

化合物テーブルへのパラメータの入力は以下のような方法があります。

3.3.2a 空の新規行を追加してパラメータを入力する

1. 化合物テーブルタブ(図3.3)をクリックする。
化合物テーブルが表示されます。
2. ツールバーの新規追加ボタンをクリックする。
新規の空行が1行追加されます。
試料テーブルに入力するパラメータを以下に示します。
「詳細表示」のカテゴリー選択タブで表示を変更して入力します。

(プロフィール)

図3.21

化合物名:	定量を行う化合物の名称を設定します。任意の文字列を設定可能ですが、他の化合物と同じ名称は設定できません。
グループ名:	化合物グループ名を設定します。同一のグループ名が指定された化合物は、合算値を定量値とします。同位体の様に複数の化合物の定量値の合算値が必要な場合に設定します。
種別:	任意の文字列を設定できます。
定量化合物:	設定する化合物が定量化合物のときチェックします。
内標化合物:	設定する化合物が内標化合物のときチェックします。
保持時間補正化合物:	設定する化合物が保持時間補正化合物 (n-アルカン) のときチェックします。
システム適合性化合物:	設定する化合物がシステム適合性化合物のときチェックします。
保持時間:	化合物の保持時間を設定します。分または時分秒または秒で設定できます。設定単位 (分, 時分秒, 秒) は基本設定画面で選択できます。
定量値係数:	定量値を乗算する値を設定します。

NISTライブラリ名:	化合物が登録されているNISTマスペクトルライブラリのライブラリ名を設定します。
NISTライブラリID:	化合物が登録されているライブラリ内のIDを設定します。
CAS番号:	化合物のCAS番号を設定します。
分子量:	化合物の分子量を設定します。
定量イオン:	定量イオン(m/z)を設定します。0を設定するとTICとして認識します。
参照イオン1:	参照イオン1(m/z)を設定します。参照イオンは最大4個指定できます。0を設定するとTICとして認識します。
参照イオン2:	参照イオン2(m/z)を設定します。参照イオンは最大4個指定できます。0を設定するとTICとして認識します。参照イオン2を設定するときは、参照イオン1は必ず設定します。
参照イオン3:	参照イオン3(m/z)を設定します。参照イオンは最大4個指定できます。0を設定するとTICとして認識します。参照イオン3を設定するときは、参照イオン1、参照イオン2は必ず設定します。
参照イオン4:	参照イオン4(m/z)を設定します。参照イオンは最大4個指定できます。0を設定するとTICとして認識します。参照イオン4を設定するときは、参照イオン1、参照イオン2、参照イオン3は必ず設定します。
I1/Q比:	定量イオンに対する参照イオン1の面積比(強度比)を設定します。
I2/Q比:	定量イオンに対する参照イオン2の面積比(強度比)を設定します。
I3/Q比:	定量イオンに対する参照イオン3の面積比(強度比)を設定します。
I4/Q比:	定量イオンに対する参照イオン4の面積比(強度比)を設定します。
(ピーク同定)	



図3.22

すべての化合物で同じ値を使用する:	「ピーク同定」タブで入力する各パラメータを, すべての化合物共通で使用するか否かを設定します。
積分方法:	定量を行う面積計算方法を設定します。接線, 自動固定範囲から選択します。
接線:	ピークの左右の谷を結んで, 面積計算を行います。
自動:	分離しているピークは左右の谷を結び, 不分離のピークは垂直分割を行います。
固定範囲:	設定した「保持時間」の面積計算範囲(−)から面積計算範囲(+)の範囲の面積を計算します。
ピーク検出感度自動設定:	ピーク検出感度(ピークの立ち上がりとする傾き)を自動的に設定するか, 「ピーク検出感度」に入力された値を固定値として使うか選択します。 自動設定にする場合, ウィンドウ幅の最大強度によりピーク検出感度は変化します。
ピーク検出感度:	ピークの立ち上がりとする傾きを設定します。
ピーク検出ウィンドウ幅:	ピーク検出を行う(「保持時間」に入力された時間を中心とした)秒数を設定します。
最小ピーク半値幅:	ピークとする最小の半値幅を設定します。
最小ピーク面積:	ピークとする最小の面積を設定します。
最小ピーク高さ:	ピークとする最小の高さを設定します。
面積計算範囲(−):	「積分方法」で固定範囲を選択したときの設定した「保持時間」からマイナス側の面積計算範囲を設定します。
面積計算範囲(+):	「積分方法」で固定範囲を選択したときの設定した「保持時間」からプラス側の面積計算範囲を設定します。
保持時間許容誤差(−):	検出されたピークの保持時間の「保持時間」に入力された値からのマイナス側許容値を設定します。
保持時間許容誤差(+):	検出されたピークの保持時間の「保持時間」に入力された値からのプラス側許容値を設定します。
I/Q比によるピーク同定を実施:	設定したIQ比と, 実測したIQ比の誤差をピーク同定に使用するか否かを設定します。I1/Q, I2/Q, I3/Q, I4/Q毎に設定します。
I1/Q比許容誤差:	I1/Q比の許容誤差を設定します。
I2/Q比許容誤差:	I2/Q比の許容誤差を設定します。
I3/Q比許容誤差:	I3/Q比の許容誤差を設定します。
I4/Q比許容誤差:	I4/Q比の許容誤差を設定します。
スペクトル類似度によるピーク同定を実施:	設定したスペクトル類似度閾値と, 実測値からライブラリサーチを行って算出したスペクトル類似度を比較してピーク同

検索質量数上限:	類似度計算を行う最大の質量を設定します。
検索質量数下限:	類似度計算を行う最小の質量を設定します。
強度閾値:	類似度計算に使用する最小の強度を設定します。
スペクトル類似度閾値:	ここに設定したスペクトル類似度以下のピークは、定量値を算出するためのピークとして使用しません。
(N.D.判定)	

図3.23

すべての化合物で同じ値を使用する:

「N.D.判定」タブで入力する各パラメータを、すべての化合物共通で使用するか否かを設定します。

定量下限:

N.D.判定を実施:

定量値が定量下限値より小さい場合N.D.とするか否かを設定します。定量下限値の計算方法は、S/N基準と標準偏差から選択します。

S/N基準:

指定した濃度の標準試料のピークのS/Nを使用して定量下限値を計算します。

定量下限値 = 標準試料の濃度 × 定量下限とするS/N ÷ S/N実測値

レベル:

定量下限値を計算する標準試料の濃度レベルを設定します。

定量下限とするS/N:

定量下限とするS/Nを設定します。

標準偏差:

指定した濃度の標準試料の定量値の標準偏差を使用して定量下限値を計算する。

定量下限値 = 定量下限係数 × 標準偏差計算値

レベル:

定量下限値を計算する標準試料の濃度レベルを設定します。

係数:

定量下限係数を設定します。

目次

検出下限:

N.D.判定を実施:

定量値が検出下限値より小さい場合N.D.とするか否かを設定します。検出下限値の計算方法は、S/N基準と標準偏差から選択します。

S/N基準:

指定した濃度の標準試料のピークのS/Nを使用して検出下限値を計算します。

検出下限値＝標準試料の濃度×検出下限とするS/N÷S/N実測値

レベル:

検出下限値を計算する標準試料の濃度レベルを設定します。

検出下限とするS/N: 検出下限とするS/Nを設定します。

標準偏差:

指定した濃度の標準試料の定量値の標準偏差を使用して検出下限値を計算します。

検出下限値＝定量下限係数×標準偏差計算値

レベル:

検出下限値を計算する標準試料の濃度レベルを設定します。

係数:

検出下限係数を設定します。

基準値:

N.D.判定を実施:

定量値が基準値の1/X以下の場合N.D.とするか否かを設定します。

基準値の1/X以下のときN.D.:

N.D.とする濃度を、基準値を単位として設定します。基準値の1/XのX値を整数で設定します。

ユーザ設定値:

N.D.判定を実施:

ユーザが任意に設定した濃度以下の場合N.D.とするか否かを設定します。

濃度:

N.D.とする濃度を設定します。

濃度単位:

ユーザ設定値の濃度単位をmg/L, μ g/L, ng/L, ppm, ppb, ppt, %から選択します。

(システム適合性)



図3.24

テーリング計算を実施する: テーリング計算 (ピーク後部のガウス曲線を外れる裾引きの算出)を実施するか否かを設定します。計算は定量イオンに設定された質量数のクロマトグラムにより行います。

テーリング計算方法: テーリング計算方法をEPA, USPから選択します。
テーリングの計算方法は以下になります。

EPA: テーリング = b/a

USP: テーリング = $(a+b)/2*a$

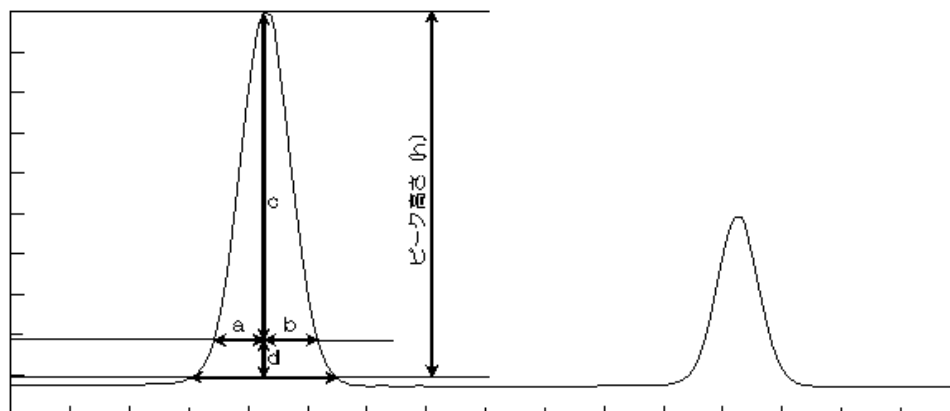


図3.25

テーリングピーク高さ位置: テーリング計算を行うピーク高さを0 (谷) から1 (ピークトップ)の実数で設定します。

S/N計算を実施する: S/N計算を実施するか否かを設定します。計算は定量イオンに設定された質量数のクロマトグラムにより行います。

S/N計算方法: S/N計算方法をPP (ピークToピーク), RMS (二乗平均平方根)から選択します。

分離度計算を実施する: 分離度 (近接ピークの分離の度合い) 計算を実施するか否かを設定します。計算は参照イオン1に設定された質量数のクロマトグラムにより行います。

分離度評価計算方法: 分離度計算方法をタンジェント, 半値幅から選択します。
分離度の計算方法は以下になります。

タンジェント: 分離度 = $F*(T_b - T_a)/(W_a + W_b)$

$F=2$ W_a と W_b は谷と谷を結んだ幅

半値幅: 分離度 = $F*(T_b - T_a)/(W_a + W_b)$

$F=1.18$ W_a と W_b はピークの半値を結んだ幅

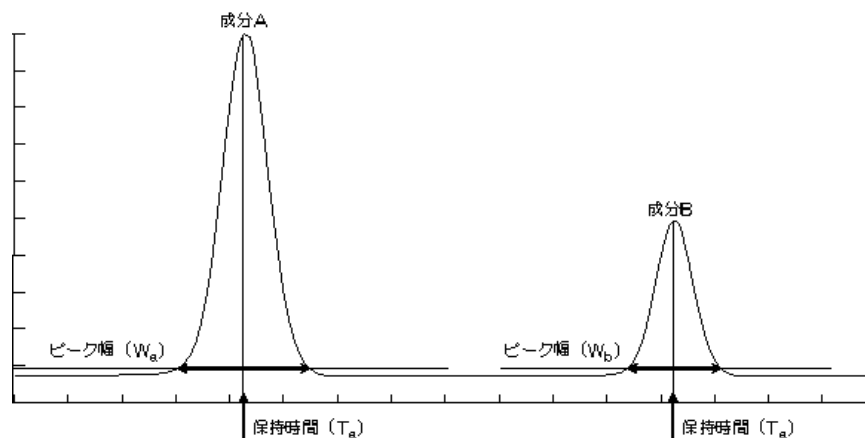


図3.26

理論段数計算を実施する： 理論段数(カラムの分離効率)計算を実施するか否かを設定します。計算は参照イオン1に設定された質量数のクロマトグラムにより行います。

理論段数計算方法： 理論段数計算方法をタンジェント, 半値幅, JISから選択します。理論段数の計算方法は以下になります。

タンジェント： $\text{理論段数} = 16 \cdot (T_a / W_a)^2$

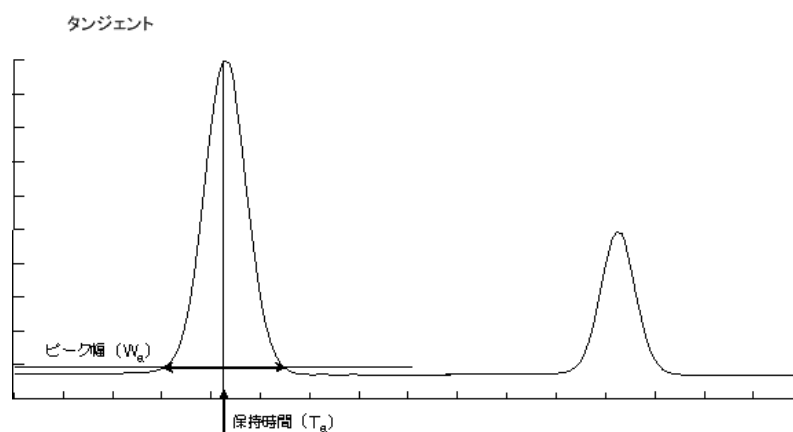


図3.27

半値幅： $\text{理論段数} = 5.54 \cdot (T_a / W_{a1/2})^2$

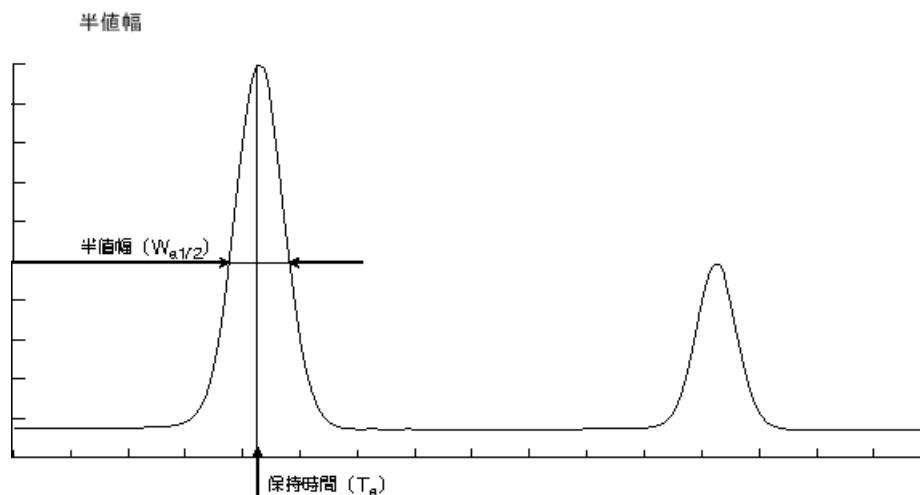


図3.28

JIS: 理論段数 = $2\pi \cdot (T_a \cdot h / A)^2$

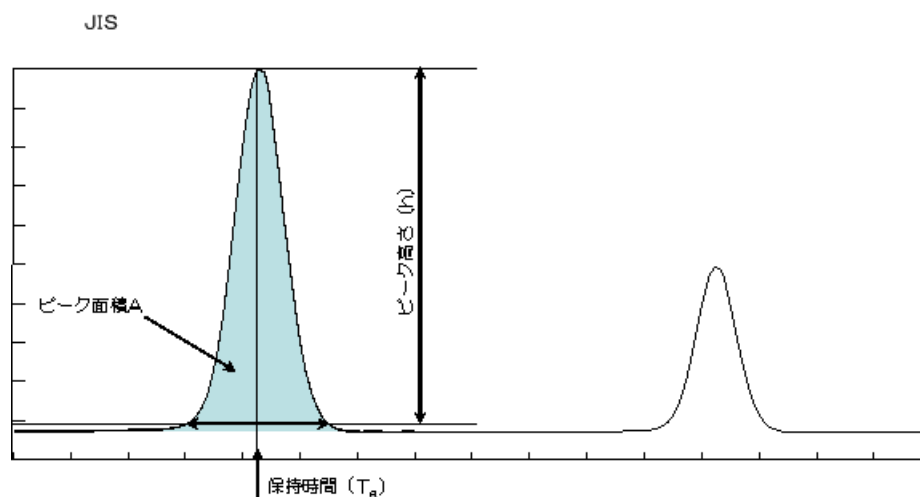


図3.29

スペクトル強度比計算を実施する:

スペクトル強度比を計算するか否かを設定します。

スペクトル強度比計算パラメータ:

スペクトル強度比を算出する質量数の組を設定します。強度比は「比較質量数/対象質量数」で算出します。複数組の設定が可能です。

対象質量数: 強度比を算出するときの分母になる質量数を設定します。

比較質量数: 強度比を算出するときの分子になる質量数を設定します。

強度比(設定値): 強度比(設定値)を設定します。

(定量計算)



図 3.30

- 検量線種類：** 標準試料により作成する、検量線の種類を選択します。検量線のX軸は標準試料の濃度、Y軸は面積値(絶対検量線法)または比率(相対検量線法)になります。
- 直線：** 標準試料の設定濃度と面積値(比率)を、一次式の最小二乗法に適用して検量線を作成します。1種類の濃度しか設定されていない場合は、「比例」と同じ計算方法になります。
- 重み付け直線：** 標準試料の設定濃度と面積値(比率)を、一次式の最小二乗法(濃度に比例しや重み付けを行う)に適用して検量線を作成します。
- 比例：** 標準試料の設定濃度と面積値(比率)を、0点を通る一次式の最小二乗法に適用して検量線を作成します。
- 二次曲線：** 標準試料の設定濃度と面積値(比率)を二次式の最小二乗法に適用して検量線を作成します。2種類の濃度しか設定されていない場合は、必ず0点を通る検量線を作成します。
- 対数：** 標準試料の設定濃度と面積値(比率)を、両対数の最小二乗法に適用して検量線を作成します。
- 濃度単位：** 標準試料の濃度単位をmg/L, μ g/L, ng/L, ppm, ppb, ppt, %から選択します。
- 濃度テーブル：** 濃度レベルと濃度の対応を設定します。濃度テーブル行追加するたびに、濃度レベルは「STD01」、「STD02」……のように自動的に追加されます。濃度レベルは試料テーブルで試料の濃度を設定するときに使用します。
- 内標化合物名：** 定量方法で「相対検量線法」選択時、添加する内標化合物を選択します。
- 絶対検量線を利用する：** 定量方法で「相対検量線法」選択時、絶対検量線法で定量を行か否かを設定します。

他の化合物の検量線を利用する:

他の化合物の検量線を利用して定量値を算出するか否かを設定します。

他の化合物の名称: 「他の化合物の検量線を利用する」場合の検量線を利用する化合物名を選択します。

保存した検量線を利用する: 定量方法で「相対検量線法」選択時, 標準試料を測定することなしに定量を行うか否かを設定します。以下の2種類の方法から選択します。

プリセット検量線を利用する:

出荷時にインストールされた検量線を利用します。基準辞書名に「食品農薬」が選択された試料に対してのみ有効です。

ユーザ検量線を利用する: ユーザが以前測定した標準試料を用いて作成した検量線を利用します。

利用する検量線ファイル名:

ユーザ検量線を利用するときの検量線ファイル名または定量条件ファイル名を設定します。

検量線を補正する:

保存した検量線を利用する場合で標準試料の測定も行った場合, 保存した検量線を, 標準試料のデータで補正するか否かを設定します。検量線の補正は, 次のような方法で行います。

標準仕様を測定していないとき: 補正は行いません。

標準試料を測定したとき: 標準試料のデータと保存した検量線のデータの比率を保存した検量線の他のデータにも適用して検量線を作成します。複数の標準試料を測定している場合は, いちばん高濃度の標準試料を用いて補正を行います。例えば測定した標準試料のデータが, 保存した検量線データの90%なら, 保存した検量線の他のデータも90%にして検量線を作成します。

添加回収試験を実施する: 添加回収試験を実施するときに設定します。

添加回収濃度テーブル: 添加回収濃度レベルと濃度の対応を設定します。添加回収濃度テーブル行追加するたびに, 濃度レベルは「REC01」, 「REC02」・・・のように自動的に追加されます。添加回収濃度レベルは試料テーブルで試料の添加回収濃度を設定するときに使用します。

(内部標準)



図3.31

内標の濃度単位： 定量方法で「相対検量線法」選択時、内標物質の濃度単位をmg/L, μ g/L, ng/L, ppm, ppb, ppt, %から選択します。

内標濃度テーブル： 内標濃度レベルと濃度の対応を設定します。内標濃度テーブル行追加するたびに、濃度レベルは「IS01」、「IS02」……のように自動的に追加されます。内標濃度レベルは試料テーブルで試料の内標濃度を設定するときに使用します。

(信頼性評価)



図3.32

IQによる信頼性評価を実施： IQ比による信頼性評価を実施するか否かを設定します。IQ比の信頼度は以下の式で求めます。

$$\text{IQ比の信頼度} = \frac{\text{IQ比1の信頼度} + \dots + \text{IQ比4の信頼度}}{\text{Iオンの設定数}}$$

$$\text{IQ比の信頼度} = \frac{(\text{IQ比1の許容誤差} - |\text{保持時間の設定値} - \text{保持時間の実測値}|)}{\text{IQ比1の許容誤差}} \times 100$$

IQによる信頼性評価係数： 総合評価にあたり, IQによる信頼性評価に対する重み付け係数を設定します。

保持時間による信頼性評価を実施：

保持時間による信頼性評価を実施するか否かを設定します。
保持時間の信頼度は以下の式で求めます。

$$\text{保持時間の信頼度} = \frac{(\text{保持時間の許容誤差} - |\text{保持時間の設定値} - \text{保持時間の実測値}|)}{\text{保持時間の許容誤差}} \times 100$$

保持時間による信頼性評価係数：

総合評価にあたり, 保持時間による信頼性評価に対する重み付け係数を設定します。

スペクトル類似度による信頼性評価を実施：

スペクトル類似度による信頼性評価を実施するか否かを設定します。スペクトルの信頼度は以下の式で求めます。

$$\text{スペクトル類似度の信頼度} = \frac{(\text{類似度の実測値} - \text{類似度の閾値})}{100 - \text{類似度の閾値}} \times 100$$

スペクトル類似度による信頼性評価係数：

総合評価にあたり, スペクトル類似度による信頼性評価に対する重み付け係数を設定します。

総合評価を「最高」とする閾値：

閾値を%で設定します。

総合評価「最高」のときの記号：

「最高」のときの記号(文字列)を設定します。

総合評価を「高」とする閾値： 閾値を%で設定します。

総合評価「高」のときの記号：「高」のときの記号(文字列)を設定します。

総合評価を「中」とする閾値： 閾値を%で設定します。

総合評価「中」のときの記号：「中」のときの記号(文字列)を設定します。

総合評価を「低」とする閾値： 閾値を%で設定します。

総合評価「低」のときの記号：「低」のときの記号(文字列)を設定します。

総合評価を「最低」とする閾値：

閾値を%で設定します。

総合評価「最低」のときの記号：

「最低」のときの記号(文字列)を設定します。

(判定)

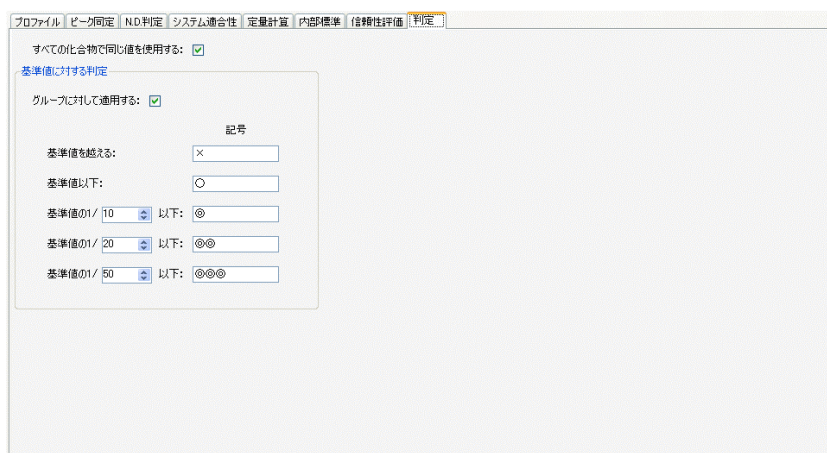


図3.33

判定をグループに対して行う：基準値判定を化合物グループに対して行うか否かを設定します。

基準値以上のときの記号：基準値判定で定量値が基準値以上のときの記号(文字列)を設定します。

基準値以下のときの記号：基準値判定で定量値が基準値以下のときの記号(文字列)を設定します。

基準値の1/X以下のときの記号：基準値判定で定量値が基準値の1/X以下のときの記号(文字列)を設定します。

X値：上記X値を設定します。

基準値の1/Y以下のときの記号：基準値判定で定量値が基準値の1/Y以下のときの記号(文字列)を設定します。

Y値：上記Y値を設定します。

基準値の1/Z以下のときの記号：基準値判定で定量値が基準値の1/Z以下のときの記号(文字列)を設定します。

Z値：上記Z値を設定します。

3.3.2b 前行をリファレンスにして複数行を追加する

1. 化合物テーブルタブをクリックする。
化合物テーブルが表示されます。
2. ツールバーの複数行追加ボタンをクリックする。
複数行追加設定画面が表示されます。

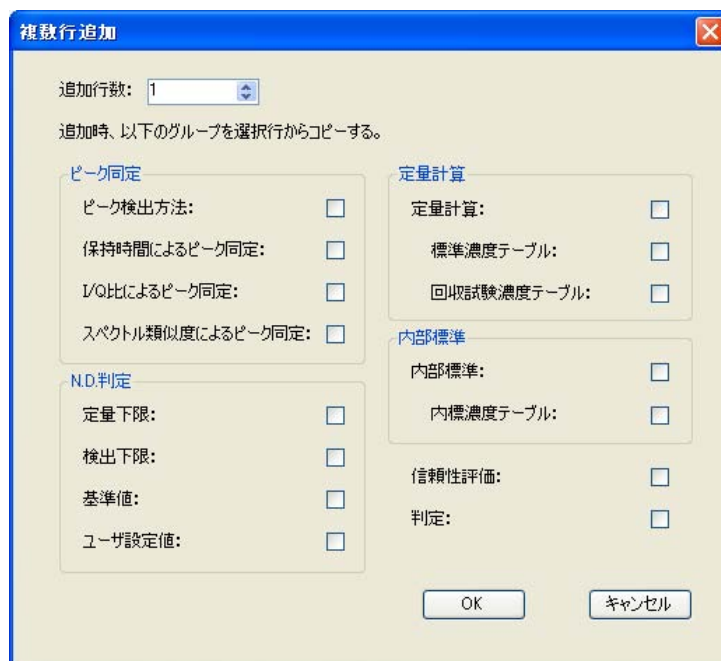


図3.34

複数行追加画面では追加行数設定、最終行からコピーする化合物テーブルの項目(グループ)の設定を行います。

3. [OK]ボタンをクリックする。
指定行数が追加されます。

3.3.2c Excelのテーブルからドラッグ&ドロップ

Excelのテーブルに化合物テーブルのプロファイルデータを登録して、それらのデータを化合物テーブルにドラッグ&ドロップで貼り付けることができます。

出荷時には「上水.xls」と「食品農薬.xls」の2つのテーブルが添付され、それぞれ基準辞書の「上水」および「食品農薬」に対応します。また「化合物テーブル.xls」という名称の空のリストも添付されます。新規リストを作成するときは、このリストから作成してください。

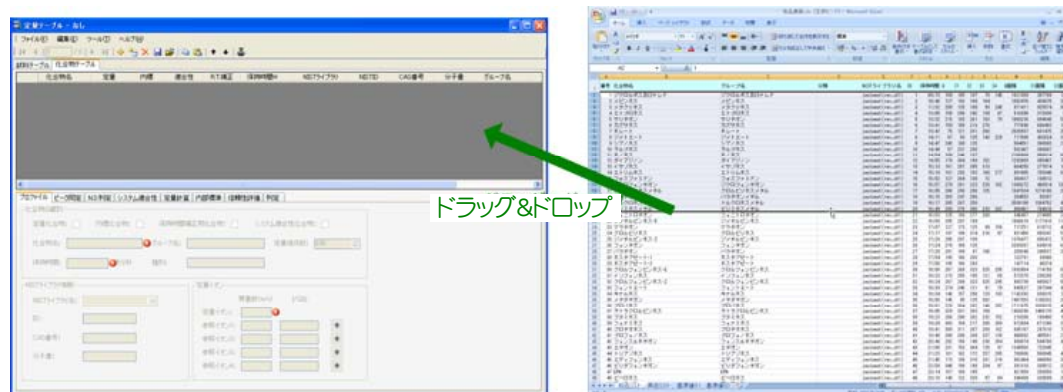
✗ 「上水.xls」と「食品農薬.xls」および「化合物テーブル.xls」は多成分定量処理プログラムがインストールされたフォルダに保存されています。

1. 化合物テーブルタブ(図3.3)をクリックする。
化合物テーブルが表示されます。
2. コピー元のExcelテーブルを表示する。
コピー元のExcelテーブルは以下の列並びになっている必要があります。
番号, 化合物名, グループ名, 分類, NISTライブラリ名, ライブラリID, 保持時間, 定

3. Excelテーブルの貼り付けたい行を選択し、選択範囲の太枠上にマウスを移動する。

[illegible]

4. マウスの左ボタンをクリックしてドラッグし、化合物テーブルでドロップする。
選択したデータが化合物テーブルに貼り付きます。



3-29

3.3.2d 定性解析プログラムからドラッグ&ドロップ

定性解析プログラムのライブラリサーチ結果を、化合物テーブルに貼りつけることができます。

1. 化合物テーブルタブ(図3.3)をクリックする。
化合物テーブルが表示されます。
2. 定性解析プログラムで、測定結果ファイルを読み込む。
3. クロマトグラム上でピークを指定するか、オートピークサーチを行う。
スペクトルが表示されます。
4. ライブラリサーチを行う。

選択されているすべてのスペクトルをライブラリサーチにかけることもできます。

ライブラリサーチ画面にライブラリサーチ結果が表示され、ヒット率のいちばん高い化合物名が、スペクトル画面に表示されます。ライブラリサーチ画面のサーチリストで化合物を変更すると、スペクトル画面に表示される化合物名も変わります。

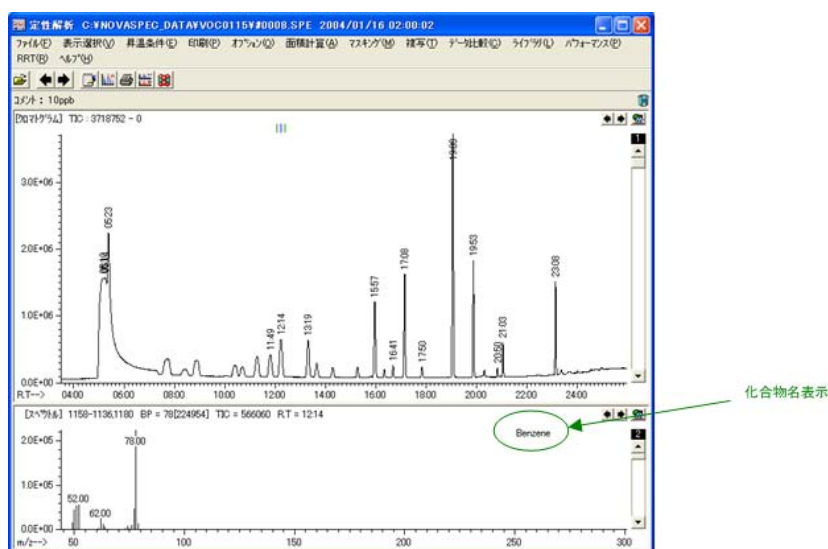


図 3.37

5. スペクトル画面の[スペクトル]と表示された位置付近をマウスの右ボタンをクリックしてドラッグし、化合物テーブルでドロップする。



図 3.38

化合物テーブルに以下の項目が貼り付けられます。

化合物名, NISTライブラリ名, ライブラリID, CAS#, 質量数, 組成式, 保持時間, 定量イオン, 定量イオン高さ, 参照イオン1, 参照イオン1高さ, 参照イオン2, 参照イオン2高さ, 参照イオン3, 参照イオン3高さ, 参照イオン4, 参照イオン4高さ

3.3.2e 共通データから貼り付け

ピーク同定, N.D.判定, 定量計算, 内部標準, 信頼性評価, 判定には個別データと共通データが存在します。共通データを使用すれば, 各パラメータの設定は一度で済みますが, 個別データにすると, 登録されている化合物毎に設定しなければなりません。ピーク同定, N.D.判定, 定量計算, 内部標準, 信頼性評価, 判定には個別データの入力を補助する機能として, 共通データからの貼り付けがあります。

1. 共通データでパラメータの設定を行う。

共通データの設定は, ピーク同定, N.D.判定, 定量計算, 内部標準, 信頼性評価, 判定の各タブで, 「すべての化合物で同じ値を使用する」のチェックを付けた上で行います。またプロファイルで, 必要なすべての化合物を登録しておきます。

2. メニューで[ツール(T)]-[共通データから貼り付け(P)]をクリックする。

ピーク同定, N.D.判定, 定量計算, 内部標準, 信頼性評価, 判定で設定された共通データが個別データにコピーされます。

3. 個別データの設定を行う。

個別データを使用するときは, ピーク同定, N.D.判定, 定量計算, 内部標準, 信頼性評価, 判定の各タブで, 「すべての化合物で同じ値を使用する」のチェックを外します。適宜化合物毎の設定を行います。

3.3.3 データの編集

3.3.3a 切り取り

1. 化合物テーブルで, 切り取る項目を選択する。

マウスの左ボタンを押しながらドラッグすることにより, 複数項目の選択ができます。また試料テーブルの1列目(グレーの部分)をマウスでクリックすることにより, 行選択ができます。

2. メニューの[編集(E)]-[切り取り(T)]またはツールバーの[切り取り]ボタンをクリックする。

選択された項目の内容が削除されます。

行選択されたデータは, 内容と行が削除されます。

3.3.3b コピー

1. 化合物テーブルで, コピーする項目を選択する。

マウスの左ボタンを押しながらドラッグすることにより, 複数項目の選択ができます。また試料テーブルの1列目(グレーの部分)をマウスでクリックすることにより, 行選択ができます。

2. メニューの[編集(E)]-[コピー(C)]またはツールバーの[コピー]ボタンをクリックする。

選択された項目の内容がクリップボードへコピーされます。列区切りはTABになります

3.3.3c 貼り付け

1. あらかじめクリップボードにデータをコピーしておく。
2. クリップボードのデータを貼り付ける, 化合物テーブルのセルを選択する。
マウスの左ボタンを押しながらドラッグすることにより, 複数セルの選択ができます。
試料テーブルの1列目(グレーの部分)をマウスでクリックすることにより, 行選択ができます。
3. メニューの[編集(E)]-[貼り付け(P)]またはツールバーの[貼り付け]ボタンをクリックする。
選択されているセルに, クリップボードの内容が貼り付けられます。

3.3.3d ソート

- ◆ 化合物テーブルで, ソートを行いたい列ヘッダーをクリックする。
ソートを行うことができる項目は, 化合物名, グループ名, 保持時間です。

試料テーブル		化合物テーブル						
		化合物名	グループ名	保持時間H	定量	内標	適合性	R.T.補正
▶ 1		ジクロロボス(DDV...	ジクロロボス(DDV...	0:06:24	☒	☐	☐	☐
2		ジクロベニル(DBN)	ジクロベニル(DBN)	0:07:11	☒	☐	☐	☐
3		エトリジアゾール(E...	エトリジアゾール(E...	0:08:10	☒	☐	☐	☐
4		クロロネブ	クロロネブ	0:08:45	☒	☐	☐	☐
5		イソプロカルブ(MIP...	イソプロカルブ(MIP...	0:09:07	☒	☐	☐	☐
6		モリネート	モリネート	0:09:16	☒	☐	☐	☐
7		フェノブカルブ(BPM...	フェノブカルブ(BPM...	0:10:05	☒	☐	☐	☐
8		トリフルラリン	トリフルラリン	0:10:59	☒	☐	☐	☐
9		ベンフルラリン(ベス...	ベンフルラリン(ベス...	0:11:05	☒	☐	☐	☐

図3.39

指定した項目で昇順ソートが行われます。同じ項目をもう一度クリックすると降順ソートが行われます。

化合物名	化合物名
9-プロモアントラセン※	モリネート
C12	メプロニル
C13	メフェナセト
C14	メチルダイムロン
C15	メチダチオン(DMTP)
C16	メタラキシル
C17	マラソン(マラチオン)
C18	ベンフルラリン(ベスロジン)
C19	ベンディメタリン
C20	ベンシクロン
C22	プロモブチド
C24	プロピザミド
C26	プロピコナゾール2
C28	プロピコナゾール1
C30	プロシミドン
EPN	プレチラクロール
EPNオキシソ	フルトラニル

図3.40

3.3.3e 行の移動

1. 化合物テーブルの移動させたい行を、行選択する。
行選択は、化合物テーブルの1列目をクリックします。
2. ツールバーの[上へ移動]ボタンまたは[下へ移動]ボタンをクリックする。
選択した行が上の行または下の行と入れ替わります。

3.3.3f 列の移動

- ◆ 化合物テーブルの移動させたい列ヘッダーをクリックし、そのままドラッグして移動させたい位置で離す。
化合物テーブルの移動させたい列ヘッダーでクリックしたままでドラッグすると、下図のように指定した項目の枠が表示されます。

試料テーブル		化合物テーブル		
	化合物名	グループ名	保持時間H	定量
▶ 1	モリネート	モリネート	0:09:16	☑
2	メプロニル	メプロニル	0:26:28	☑
3	メフェナセット	メフェナセット	0:30:15	☑
4	メチルダイムロン	メチルダイムロン	0:20:43	☑
5	メチダチオン(DMTP)	メチダチオン(DMTP)	0:21:50	☑
6	メタラキシル	メタラキシル	0:16:27	☑
7	マラソン(マラチオン)	マラソン(マラチオン)	0:17:59	☑
8	ベンフルラリン(バスロジン)	ベンフルラリン(バスロジン)	0:11:05	☑
9	ベンディメタリン	ベンディメタリン	0:20:04	☑
10	ベンシクロン	ベンシクロン	0:11:28	☑
11	プロモブチド	プロモブチド	0:15:37	☑

図3.41

表示された枠を、移動させたい位置へ移動させ、離します。

3.3.3g 保持時間のオフセット

1. メニューの[ツール(T)]-[保持時間のオフセット(R)]をクリックする。
保持時間のオフセット画面が表示されます。

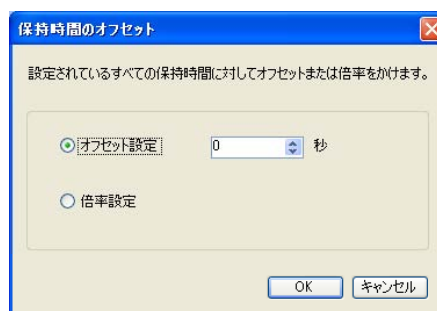


図3.42

2. 「オフセット設定」または「倍率設定」のどちらかを選択する。
「オフセット設定」を選択したときは、オフセット値を秒単位(整数)で設定します(-600～600)。
「倍率設定」を選択したときは、乗算値0.01～100の間の実数で設定します。

3. [OK]ボタンをクリックする。

化合物テーブルに登録されているすべての化合物の保持時間が、設定されたオフセットまたは倍率で更新されます。

3.4 処理条件の設定

1. メニューの[ツール(T)]-[処理条件(P)]をクリックする。

処理条件画面が表示されます。



図3.43

処理条件画面では以下の項目を入力します。

定量方法：

定量方法を選択します。選択できる定量方法は以下になります。

相対検量線法：

相対検量線法で定量を行う時に選択します。相対検量線法は以下の方法で定量値を求めます。

あらかじめ標準試料に添加した内標準化合物との相対感度から各化合物の検量線を作成しておき、これに未知試料のピークの面積比を当てはめることにより目的成分の定量値を求める。

$$\text{定量値} = \frac{Ax / As - b}{a} \times \frac{Vx}{Vs} \times DF$$

a: 検量線の傾き

b: 検量線の切片

Ax: ピーク面積

As: 内部標準化合物のピーク面積値

Vx: サンプルの内標濃度

目次

	Vs: 検量線の内標濃度 (いちばん低濃度における) DF: 希釈率
絶対検量線法:	絶対検量線法で定量を行う時に選択します。絶対検量線法は以下の方法で定量値を求めます。 あらかじめ標準試料中の成分の絶対量 (濃度) とそのピーク面積の検量線を作成しておき, 同一条件で未知試料を分析して, そのピークの面積を検量線に当てはめることによって目的成分の定量値を求める。 $\text{定量値} = \frac{Ax - b}{a} \times DF$ a: 検量線の傾き b: 検量線の切片 Ax: ピーク面積 (あるいは高さ) DF: 希釈率
定量フォルダ:	定量フォルダをフルパスで設定します。「...」ボタンをクリックすると表示する, フォルダ選択画面から設定します。 定量フォルダとは定量条件ファイル, 測定結果ファイル等定量処理に必要なファイルが保存されるフォルダです。詳細は下記注釈をご覧ください。
測定フォルダ:	測定結果ファイルが保存されるフォルダをフルパスで設定します。「...」ボタンをクリックすると表示する, フォルダ選択画面から設定します。 測定結果ファイルは定量処理時に定量フォルダにコピーされます。通常は定量フォルダと測定フォルダは同じにします。
積算回数:	3点の移動平均の回数を設定します。
定量計算の並行処理:	シーケンスプログラムで処理項目に「測定／解析」を選択してシーケンス処理を開始したとき, 測定と平行して定量計算を行うか否かを選択します。
コメント(カラム名):	カラム名として任意の文字列を入力します。
コメント(定量コメント):	定量コメントとして任意の文字列を入力します。
報告書印刷(個別試料データ):	試料毎の印刷を行う場合の印刷条件を設定します。
報告書印刷(試料間データ):	複数試料共通または複数試料にまたがる結果の印刷を行う場合の印刷条件を設定します。
印刷フォーマット:	分析結果報告書作成ソフトで作成された印刷テンプレートを設定します。
自動印刷:	シーケンスプログラムから定量条件プログラムを起動したとき, 定量処理後, 登録された印刷フォーマットで, 自動的に印刷を行うか否かを設定します。

2. 必要な項目を入力後[OK]ボタンをクリックする。

✂ 定量解析プログラムで定量を行う時は、測定結果ファイル、定量条件ファイルは同じフォルダに置く必要があります。このフォルダを定量フォルダと呼びます。また定量結果は定量フォルダ内に定量条件ファイル名と同じ名前のフォルダを作成して、そのフォルダの中に保存します。定量結果ファイルは、測定結果ファイルの数だけ作成されます。1つの定量条件ファイルにつき、1つの定量結果フォルダと定量結果フォルダ内に複数の定量結果ファイルが作成されます。

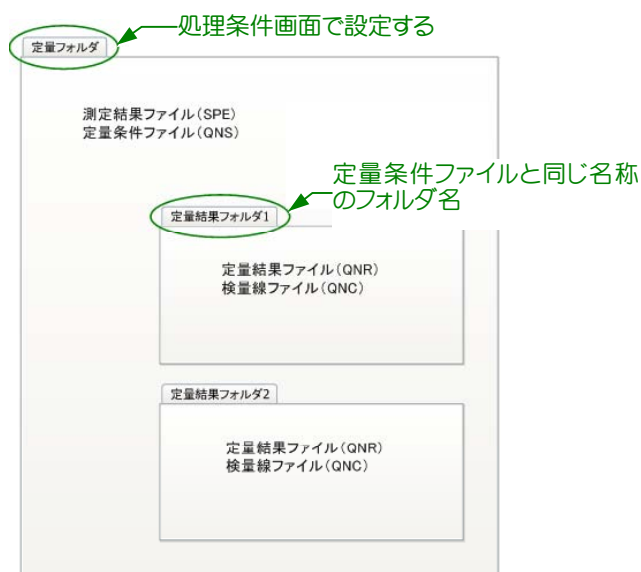


図3.44

定量結果ファイル名は次のような規則で自動的に付けられます。

定量条件ファイル名をXXXX.QNSとすると、
XXXX_001.QNR, XXXX_002.QNR, ...
という名称で作成されます。

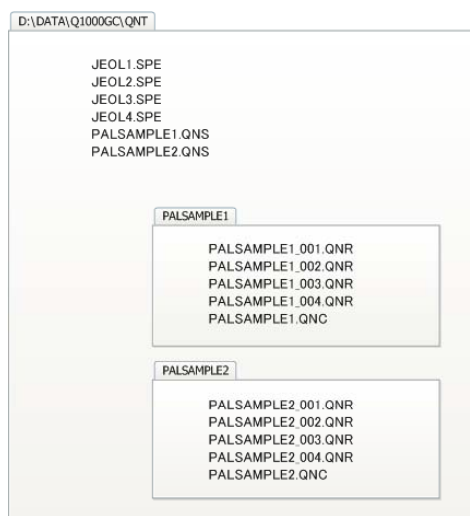


図3.45

3.5.1 保存

- データチェックが行われ、エラーがあるときはエラーリストが表示されます。

- 保存するフォルダ名、ファイル名を設定して「保存」ボタンをクリックすると定量条件がファイルに保存されます。

3.5.2a 試料テーブルの印刷

- 試料テーブルのプレビュー画面が表示されます。

試料データベース

メインレポート

試料データベース

C:\NovaSpec\Data\WVOC\WVOC.one

No	試料名	入力名	検閲	分析値カラム名	ピーク名	シフト名	検量線	標準濃度	添加濃度	内標濃度	グループ	測定方法	基準線表
1	試料 試料_001.SP				試料 試料_001.SP	C:\NovaSpec\Data\WVOC\WVOC.one	標準線表1	STD01		100			上本
2	試料 試料_002.SP				試料 試料_002.SP	C:\NovaSpec\Data\WVOC\WVOC.one	標準線表1	STD02		100			上本
3	試料 試料_003.SP				試料 試料_003.SP	C:\NovaSpec\Data\WVOC\WVOC.one	標準線表1	STD03		100			上本
4	試料 試料_004.SP				試料 試料_004.SP	C:\NovaSpec\Data\WVOC\WVOC.one	標準線表1	STD04		100			上本
5	試料 試料_005.SP				試料 試料_005.SP	C:\NovaSpec\Data\WVOC\WVOC.one	標準線表1	STD05		100			上本
6	試料 試料_006.SP				試料 試料_006.SP	C:\NovaSpec\Data\WVOC\WVOC.one	標準線表1	STD06		100			上本

現在ページ番号: 1

合計ページ数: 1

ズーム率: 100%

Figure 3.46 is a line graph with the x-axis labeled 'Number of people' and the y-axis labeled 'Number of people who can be reached'. Both axes range from 0 to 10. A straight line is drawn from the origin (0,0) to the point (10,10), representing a 1:1 relationship.

- プリンタ設定ダイアログ画面が表示されて、[OK]ボタンをクリックすると印刷されます。

プレビュー画面でエクスポートボタンをクリックすると、印刷イメージをPDF形式やWord形式等でファイルに保存できます。

3.5.4 追加時の初期設定

1行追加時の初期値を設定することができます。

3.5.4a 試料テーブルの初期値設定

1. メニューの[ツール(T)]-[初期設定(I)]-[試料テーブル追加(S)]をクリックする。
試料テーブル追加時の初期値設定画面が表示されます。

図 3.49

追加時の初期値を設定できる項目は以下です。

分析機関ID, 分析者ID, クライアントID, 印刷コメントID, 基準辞書名, 分類名, 希釈率, 試料種類。

2. 各項目の設定を行い, [OK]ボタンをクリックする。

設定項目のうち, 分析機関ID, 分析者ID, クライアントID, 印刷コメントIDについては, キーボードからの直接入力はできません。「DBから入力」ボタンをクリックして表示される, 印刷情報設定画面から取り込みます。印刷情報設定画面での設定方法は, 「3.1.3項 データの編集」の「ID編集」を参照ください。

3.5.4b 化合物テーブルの初期値設定

1. メニューの[ツール(T)]-[初期設定(I)]-[化合物テーブル追加(C)]をクリックする。
化合物テーブル追加時の初期設定画面が表示されます。

図 3.50

2. 各項目の設定を行い, [OK]ボタンをクリックする。
共通データ, 個別データともに同じ初期値が設定されます。

3.5.5 データチェック

1. メニューの[ツール(T)]-[データチェック(C)]をクリックする。
試料テーブル, 化合物テーブル, 処理条件にエラーがあるとエラーリスト画面が表示されます。

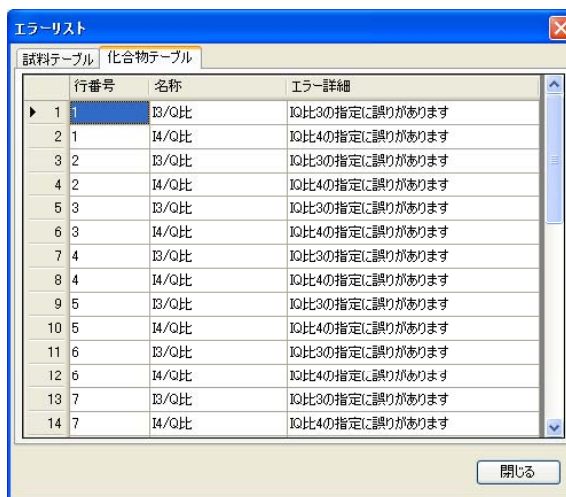


図 3.51

- ② エラーリストの各行をクリックする。
エラーリストで指定した行の試料テーブルのまたは化合物テーブルの行が表示されます。

3.5.6 シーケンス起動

- ◆ メニューの[ツール(T)]-[シーケンス起動(S)]をクリックする。
試料テーブルに設定したパラメータでシーケンスプログラムを起動します。

4

定量解析

4.1	定量解析.....	4-1
4.2	定量解析の方法.....	4-2
4.3	データの表示.....	4-3
4.3.1	化合物一覧.....	4-4
4.3.1a	定量結果の確認.....	4-4
4.3.1b	定量結果のソート.....	4-8
4.3.1c	化合物条件の確認および一部のデータの変更.....	4-8
4.3.2	試料一覧.....	4-9
4.3.2a	試料条件の確認および一部のデータの変更.....	4-9
4.3.2b	指定試料のTIC表示.....	4-10
4.3.2c	処理条件の確認および一部のデータの変更.....	4-11
4.3.3	定量結果一覧.....	4-11
4.3.4	検量線.....	4-12
4.3.4a	指定化合物の検量線表示.....	4-12
4.3.4b	検量線の変更.....	4-13
4.3.5	保持時間予測.....	4-14
4.3.5a	保持時間予測データの表示.....	4-14
4.3.5b	保持時間予測データの修正.....	4-14
4.3.6	システム適合性.....	4-15
4.4	グラフの表示.....	4-16
4.4.1	1検体1成分表示.....	4-16
4.4.1a	表示方法.....	4-16
4.4.1b	表示アイテムの選択.....	4-17
4.4.1c	表示方法の変更.....	4-17
4.4.1d	同時表示数の設定.....	4-19
4.4.1e	表示強度範囲の自動設定.....	4-20
4.4.1f	表示強度範囲の手動設定.....	4-21
4.4.1g	表示時間範囲の設定.....	4-22
4.4.1h	表示時間範囲の移動.....	4-22
4.4.1i	面積設定(データ間を結ぶ).....	4-23

4.4.1j	面積設定(任意点間を結ぶ)	4-25
4.4.1k	スペクトル表示設定	4-26
4.4.1l	表示色設定	4-26
4.4.1m	クリップボードへコピー	4-27
4.4.2	複数検体1成分表示	4-28
4.4.2a	表示方法	4-28
4.4.2b	表示方法の変更	4-30
4.4.2c	同時表示数の設定	4-30
4.4.2d	表示強度範囲の自動設定	4-31
4.4.2e	表示強度範囲の手動設定	4-32
4.4.2f	表示時間範囲の設定	4-32
4.4.2g	表示時間範囲の移動	4-33
4.4.2h	面積設定(データ間を結ぶ)	4-33
4.4.2i	面積設定(任意点間を結ぶ)	4-35
4.4.2j	クリップボードへコピー	4-36
4.4.3	1検体複数成分表示	4-36
4.4.3a	表示方法	4-36
4.4.3b	表示方法の変更	4-38
4.4.3c	同時表示数の設定	4-38
4.4.3d	表示強度範囲の自動設定	4-39
4.4.3e	表示強度範囲の手動設定	4-40
4.4.3f	表示時間範囲の設定	4-40
4.4.3g	表示時間範囲の移動	4-41
4.4.3h	スペクトル表示設定	4-41
4.4.3i	クリップボードへコピー	4-42
4.5	オプション設定	4-42
4.5.1	基本設定	4-42
4.5.2	化合物一覧	4-43
4.5.3	試料一覧	4-44
4.5.4	検量線表示	4-44
4.5.5	クロマトグラム表示	4-46
4.5.6	クロマトグラム表示(複数検体)	4-47
4.5.7	クロマトグラム表示(複数成分)	4-49
4.5.8	スペクトル表示	4-51
4.6	その他の機能	4-52
4.6.1	保存	4-52
4.6.1a	上書き保存	4-52
4.6.1b	名前を付けて保存	4-52
4.6.1c	保持時間更新ファイルの作成	4-53
4.6.2	印刷	4-54
4.6.2a	印刷	4-54
4.6.2b	フォーマットを指定して印刷	4-54
4.6.2c	印刷設定(化合物毎)	4-58
4.6.3	コピー	4-59
4.6.4	検索	4-59
4.6.5	化合物スライドショー	4-60
4.6.6	プログラムの終了	4-60

4.1 定量解析

定量解析プログラムでは定量条件ファイルと測定結果ファイル読み込んで、定量処理を実施し、結果を画面に表示します。

同時に定量結果ファイルに定量結果データを書き出します。

- ◆ Q1000GCメインプログラム画面の「Q1000GCアプリケーション」アイコングループ内、「定量解析」アイコン(図4.1)をダブルクリックする。



図4.1

定量解析プログラムの初期画面が表示されます。

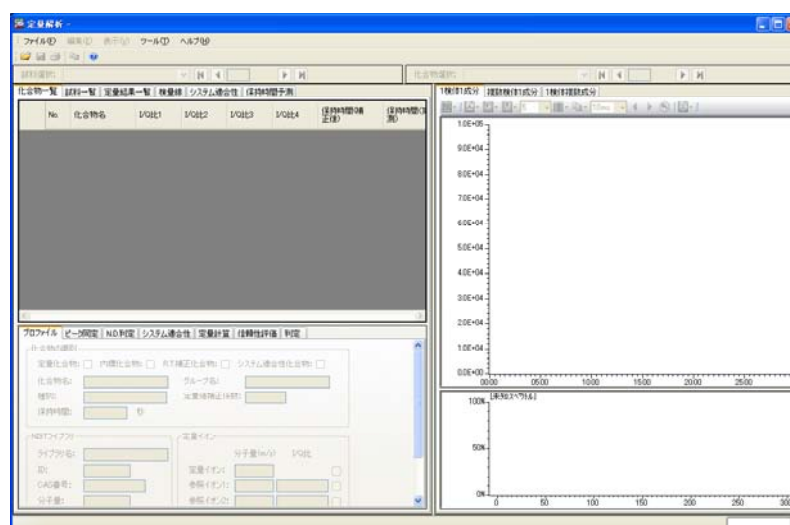


図4.2

定量条件ファイルを読み込むと以下のような表示になります。

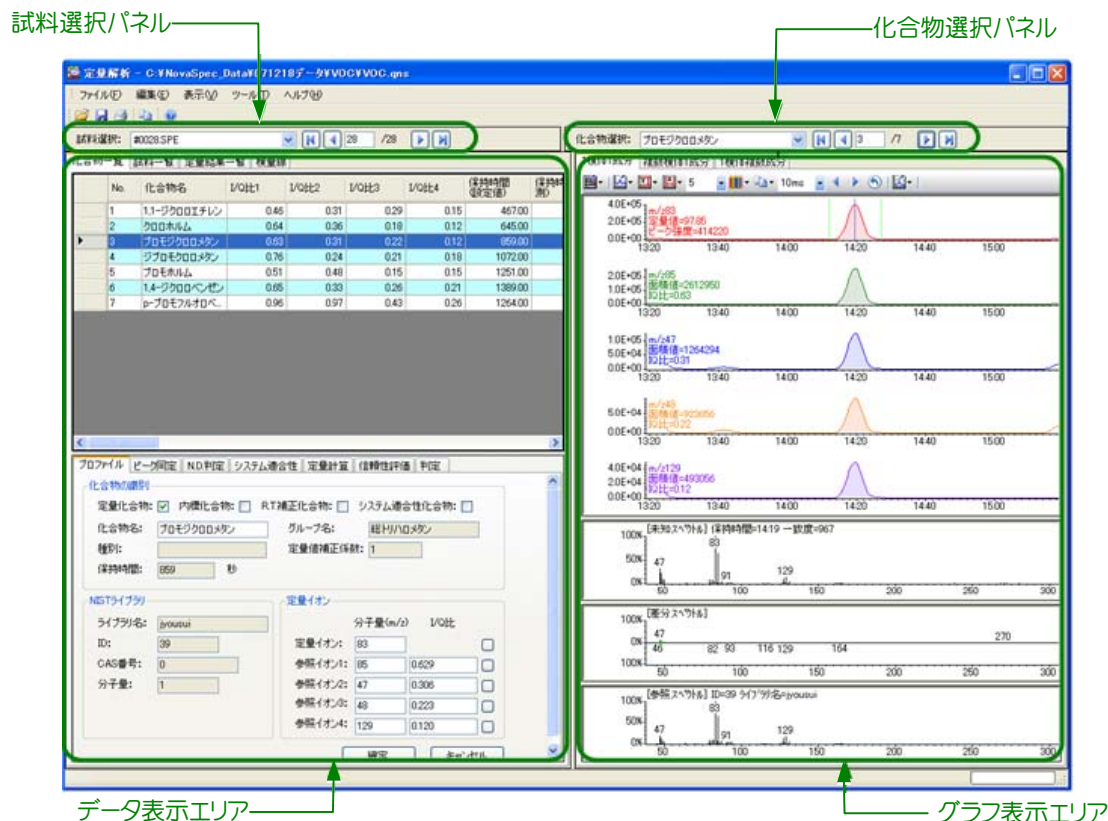


図4.3

4.2 定量解析の方法

1. メニューの[ファイル(F)]-[開く(O)]をクリックする。
ファイル選択ダイアログ画面が表示されます。
2. 定量解析を行う定量条件ファイルを選択し、「開く」ボタンをクリックする。
定量条件ファイルは、定量条件設定プログラムで作成します。
定量条件ファイルが読み込まれ、次の順番で定量処理が行われます。
 - 定量条件ファイルを読み込む。
 - 測定結果ファイルを読み込む。
 - 測定結果データのピーク判定を行い、いちばん確からしいピークを取得する。
 - ピークの面積を計算する。
 - 検量線を作成する。
 - 定量値を算出する。
 - 基準値判定を行う。
 - 定量結果ファイル、検量線ファイルを作成する。
 - 結果を表示する。
 - 結果を印刷する(シーケンスプログラムから起動されて、定量条件に、「自動印刷」が設定されているとき)。

3. 自動的に行われたピーク判定や面積計算範囲の設定等を確認, 調整する。

☞ 確認, 調整方法は, 「4.2節」, 「4.3節」をご覧ください。

✗ 定量条件ファイルを読み込んだとき, すでに対応する定量結果ファイルが存在していて, 定量結果ファイルが作成されて以降定量条件ファイルが変更されていないときは, 定量値の再計算を行わず, すでに作成されている定量結果ファイルのデータを表示します。

✗ 定量化合物数や試料数が多い場合は, 定量処理に時間がかかる場合があります。

4.3 データの表示

定量条件, 定量結果, 検量線等のデータは「データ表示エリア」に表示されます。

「データ表示エリア」タブにより表示が変化します。以下の表示が可能です。

化合物一覧:	化合物条件および化合物毎の定量結果を表示します。
試料一覧:	試料条件およびTICグラフを表示します。
定量結果一覧:	定量値等を化合物と試料の一覧で表示します。
検量線:	検量線グラフおよびデータを表示します。
保持時間補正:	保持時間補正化合物のクロマトグラムおよびデータを表示します。保持時間補正試料が選択されているときのみ表示します。
システム適合性:	カラムパフォーマンス等の計算結果を表示します。性能テスト試料が選択されているときのみ表示します。

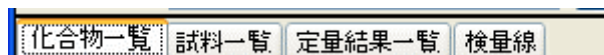


図4.4 データ表示エリアのタブ

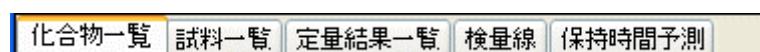


図4.5 データ表示エリアのタブ(保持時間予測試料)

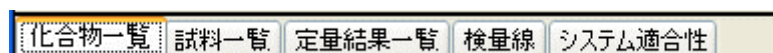


図4.6 データ表示エリアのタブ(性能テスト試料)

4.3.1 化合物一覧

4.3.1a 定量結果の確認

1. 「データ表示エリア」の「化合物一覧」タブをクリックする。
「データ表示エリア」に化合物一覧パネルが表示されます。

定量結果リスト

No.	化合物名	I/Q比1	I/Q比2	I/Q比3	I/Q比4	保持時間(定値)
1	1,1-ジクロロエチレン	0.82	0.52	253.31	0.32	411.00
2	ジクロロメタン	0.93	0.61			465.00
3	トランス-1,2-ジクロロ...	1.05	0.68	0.40	0.34	488.00
4	シス-1,2-ジクロロ...	1.15	0.65	0.31	0.32	587.00
5	クロロホルム	0.66	0.27	0.14	0.11	607.00
6	1,1,1-トリクロロエタ...	0.64	0.34	0.10	0.11	639.00
7	四塩化炭素	0.94	0.30	0.25	0.27	665.00
8	ベンゼン	0.27	0.17	0.18	0.13	689.00
9	1,2-ジクロロエタン	0.38	0.24	0.12	0.17	702.00
10	フルオロベンゼン	0.15	0.11	0.10	0.07	715.00
11	トリクロロエチレン	0.96	0.90	0.59	0.30	761.00
12	1,2-ジクロロプロパン	0.70	1.83	0.64	0.32	791.00
13	ブromochloromethane	0.65	0.20	0.13	0.14	823.00

化合物条件詳細

化合物の識別
 定量化合物: ☒ 内標化合物: ☐ RT補正化合物: ☐ システム適合性化合物: ☐
 化合物名: 1,1-ジクロロエチレン グループ名: 1,1-ジクロロエチレン
 種別: 定値補正係数: 1
 保持時間: 411 秒

NISTライブラリ
 ライブラリ名: jvousi
 ID: 16
 CAS番号: 0
 分子量: 1

定量イオン
 質量数(m/z) I/Q比
 定量イオン: 61
 参照イオン1: 96 0.787
 参照イオン2: 98 0.514
 参照イオン3: 43 0.418
 参照イオン4: 63 0.330

確定 キャンセル

図 4.7

「定量結果リスト」に、化合物毎の定量値、I/Q比、実測保持時間等の定量結果と化合物条件の一部が表示されます。「定量結果リスト」に表示されるデータは、自動的にファイルに保存されます。

「化合物条件詳細」には、定量条件ファイルに記述された、化合物条件が表示されます。「定量結果リスト」に表示できる項目を以下に示します。

- 化合物番号: 定量結果リスト内での連番が表示されます。
- 化合物名: 化合物条件に設定された化合物名が表示されます。
- スムージング回数: 処理条件に設定されたスムージング回数が表示されます。
- I/Q比1 (実測): 定量イオンに対する参照イオン1の面積比(強度比)の実測値が表示されます。
- I/Q比2 (実測): 定量イオンに対する参照イオン2の面積比(強度比)の実測値が表示されます。
- I/Q比3 (実測): 定量イオンに対する参照イオン3の面積比(強度比)の実測値が表示されます。
- I/Q比4 (実測): 定量イオンに対する参照イオン4の面積比(強度比)の実測値が表示されます。

目次

保持時間(補正後):	保持時間予測が行われたときの保持時間補正值が表示されます。保持時間予測が行われない場合は、化合物条件に設定された保持時間が表示されます。
保持時間(実測):	保持時間の実測値が表示されます。
保持時間差:	補正後の保持時間と実測の保持時間の差が表示されます。
表示ウィンドウの幅(+方向):	設定保持時間を中心とした+側表示幅が表示されます。
表示ウィンドウの幅(-方向):	設定保持時間を中心とした-側表示幅が表示されます。
スペクトル類似度:	スペクトル類似度の実測値が表示されます。
保持時間判定:	保持時間判定結果が表示されます。OKまたはNGで表示されます。
I/Q比判定:	I/Q比判定結果表示されます。OKまたはNGで表示されます。
スペクトル類似度判定:	スペクトル類似度判定結果表示されます。OKまたはNGで表示されます。
定量値:	指定した検量線法で計算された定量値が表示されます。
グループ定量値:	同じグループの化合物の定量値を合算した定量値が表示されます。
定量値単位:	定量値の単位が表示されます。
N.D.理由:	定量値が計算できなかった時(N. D.)の理由が表示されます。定量値は0と表示されます。
定量イオン面積:	定量イオンの面積が表示されます。
濃度:	試料種類が「標準試料」のときの標準濃度が表示されます。
添加濃度:	試料種類が「添加回収」のときの添加濃度が表示されます。
回収率:	試料種類が「添加回収」のときの回収率が表示されます。 回収率の計算は、直前の試料(標準試料または定量試料)の間で行います。回収率の計算方法は以下になります。
$\text{回収率} = \frac{C_f - C_u}{C_a} \times 100 \quad (\text{直前の試料が定量試料})$	
$\text{回収率} = \frac{C_f}{C_a} \times 100 \quad (\text{直前の試料が標準試料})$	
Cf: 添加した試料を分析した濃度(添加回収試料)	
Cu: 添加した試料を分析した濃度(定量試料)	
Ca: 添加した既知の濃度	
内標準濃度:	定量方法が「相対検量線」のときの内標濃度が表示されます。
基準値:	基準辞書に登録してある基準値が表示されます。
基準値判定:	基準値の判定結果が表示されます。記号(文字列)で表示されます。

グループ基準値:	同じグループの化合物に対する、基準辞書に登録してある基準値が表示されます。
グループ基準値判定:	同じグループの化合物に対する基準値の判定結果が表示されます。
信頼性評価:	定量値信頼度の評価結果が表示されます。記号(文字列)で表示されます。
信頼度(総合):	定量値信頼度(総合)の評価結果が表示されます。数値で表示されます。
信頼度(保持時間):	定量値信頼度(保持時間)の評価結果が表示されます。数値で表示されます。
信頼度(I/Q比):	定量値信頼度(I/Q比)の評価結果が表示されます。数値で表示されます。
信頼度(スペクトル類似度):	定量値信頼度(スペクトル類似度)の評価結果が表示されます。数値で表示されます。
定量下限値(S/N):	S/Nによる定量下限値計算結果が表示されます。
検出下限値(S/N):	S/Nによる検出下限値計算結果が表示されます。
平均値:	同じグループ名試料の定量値の平均が表示されます。
平均値の判定:	同じグループ名試料の定量値の判定が表示されます。
標準偏差:	同じグループ名試料の定量値の標準偏差が表示されます。
変動係数:	同じグループ名試料の定量値の変動係数が表示されます。
定量下限値(標準偏差):	標準偏差による定量下限値計算結果が表示されます。
検出下限値(標準偏差):	標準偏差による検出下限値計算結果が表示されます。
定量化合物:	化合物条件で設定された、定量化合物であるか否かが表示されます。
内標化合物:	化合物条件で設定された、内標化合物であるか否かが表示されます。
保持時間補正化合物:	化合物条件で設定された、保持時間補正化合物であるか否かが表示されます。
システム適合性化合物:	化合物条件で設定された、システム適合性化合物であるか否かが表示されます。
グループ名:	化合物条件で設定された化合物グループ名が表示されます。
種別:	化合物条件で設定された種別が表示されます。
保持時間(設定):	化合物条件で設定された保持時間が表示されます。分または時分秒または秒で設定できます。設定単位(分, 時分秒, 秒)は基本設定画面で選択できます。
定量値係数:	化合物条件で設定された定量値係数が表示されます。

目次

NISTライブラリ名:	化合物条件で設定されたNISTマススペクトルライブラリのライブラリ名が表示されます。
NISTライブラリID:	化合物条件で設定されたNISTマススペクトルライブラリのライブラリIDが表示されます。
CAS番号:	化合物条件で設定された化合物のCAS番号が表示されます。
分子量:	化合物条件で設定された化合物の分子量が表示されます。
I1/Q比(設定):	化合物条件で設定された定量イオンに対する参照イオン1の面積比(強度比)が表示されます
I2/Q比(設定):	化合物条件で設定された定量イオンに対する参照イオン2の面積比(強度比)が表示されます
I3/Q比(設定):	化合物条件で設定された定量イオンに対する参照イオン3の面積比(強度比)が表示されます
I4/Q比(設定):	化合物条件で設定された定量イオンに対する参照イオン4の面積比(強度比)が表示されます

 化合物リストに表示する項目は、「オプション設定画面」で選択できます(「4.4.2項」参照)。また項目の表示順は以下の要領で任意に変更できます。

2. 確認したい試料を選択する。

現在選択されている試料と違う試料の定量結果を確認したいときは、「試料選択パネル」により、表示する試料を選択します。以下の方法で選択できます。

- 「測定結果ファイル名」をクリックすると、ファイル名プルダウンリストが表示されるので、ファイル名を選択する。
- 「最初の試料」「最後の試料」「前の試料」「次の試料」の各ボタンをクリックする。
- 「試料の番号」に直接試料番号を入力して[リターン]キーを押す。

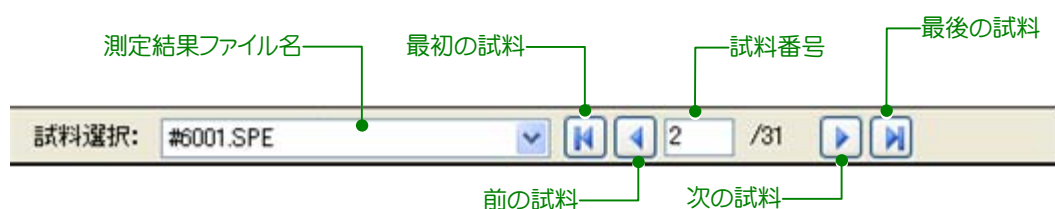


図4.8

4.3.1b 定量結果のソート

1. 「データ表示エリア」の「化合物一覧」タブをクリックする。
「データ表示エリア」に化合物一覧パネルが表示されます。
2. ソートを行いたい項目名をマウスの左ボタンでクリックする。
昇順ソートが行われます。

昇順ソートの記号

No.	化合物名	保持時間 (補正後)	保持時間 (実測)	保持時間差	表示ウィンドウ幅 (+方向)
6	1,1,1-トリクロロエタ...	639.00	639.46	-0.46	60
17	1,1,2-トリクロロエタ...	984.00	983.86	0.14	60
1	1,1-ジクロロエチレン	411.00	412.01	-1.01	60
9	1,2-ジクロロエタン	702.00	702.03	-0.03	60
12	1,2-ジクロロプロパン	791.00	791.71	-0.71	60
24	1,4-ジクロロベンゼン	1509.00	1508.56	0.44	60
20	m,p-キシレン	1144.00	1144.25	-0.25	60
21	o-キシレン	1211.00	1211.31	-0.31	60
23	p-プロモフルオロベ...	1317.00	1317.34	-0.34	60
5	クロロホルム	607.00	607.74	-0.74	60
2	ジクロロメタン	465.00	464.56	0.44	60
4	シス-1,2-ジクロロ...	587.00	586.90	0.10	60
14	シス-1,3-ジクロロ...	885.00	885.06	-0.06	60
19	ジプロモクロロメタン	1056.00	1056.34	-0.34	60
18	テトラクロロエチレン	1003.00	1003.78	-0.78	60
3	トランス-1,2-ジクロ...	488.00	488.12	-0.12	60

図4.9

次に項目名をクリックすると、降順ソートが行われます。

降順ソートの記号

No.	化合物名	保持時間 (補正後)	保持時間 (実測)	保持時間差	表示ウィンドウ幅 (+方向)
18	テトラクロロエチレン	1003.00	1003.78	-0.78	60
19	ジプロモクロロメタン	1056.00	1056.34	-0.34	60
14	シス-1,3-ジクロロ...	885.00	885.06	-0.06	60
4	シス-1,2-ジクロロ...	587.00	586.90	0.10	60
2	ジクロロメタン	465.00	464.56	0.44	60
5	クロロホルム	607.00	607.74	-0.74	60
23	p-プロモフルオロベ...	1317.00	1317.34	-0.34	60
21	o-キシレン	1211.00	1211.31	-0.31	60
20	m,p-キシレン	1144.00	1144.25	-0.25	60
24	1,4-ジクロロベンゼン	1509.00	1508.56	0.44	60
12	1,2-ジクロロプロパン	791.00	791.71	-0.71	60
9	1,2-ジクロロエタン	702.00	702.03	-0.03	60
1	1,1-ジクロロエチレン	411.00	412.01	-1.01	60
17	1,1,2-トリクロロエタ...	984.00	983.86	0.14	60
6	1,1,1-トリクロロエタ...	639.00	639.46	-0.46	60

図4.10

行の順番を元に戻すには、「No.」項目をクリックします。

4.3.1c 化合物条件の確認および一部のデータの変更

1. 「データ表示エリア」の「化合物一覧」タブをクリックする。
「データ表示エリア」に化合物一覧パネルが表示されます。
2. 確認したい試料を選択する。

目次

3. 「定量結果リスト」で確認および変更を行いたい化合物を選択する。

「化合物条件詳細」に、「定量結果リスト」で選択された化合物の化合物条件が表示されます。

「化合物選択パネル」でも化合物を選択できます。以下の方法で選択できます。

- 「化合物名」をクリックすると、化合物名プルダウンリストが表示されるので、化合物名を選択する。
- 「最初の化合物」「最後の化合物」「前の化合物」「次の化合物」の各ボタンをクリックする。
- 「試料の化合物」に直接化合物番号を入力して[リターン]キーを押す。



図 4.11

4. 化合物条件を変更して[確定]ボタンをクリックする。

定量値の再計算を行います。

「化合物条件詳細」で白地の項目のみ変更可能です。グレー字の項目は変更不可です。

4.3.2 試料一覧

4.3.2a 試料条件の確認および一部のデータの変更

1. 「データ表示エリア」の「試料一覧」タブをクリックする。

「データ表示エリア」に試料一覧パネルが表示されます。

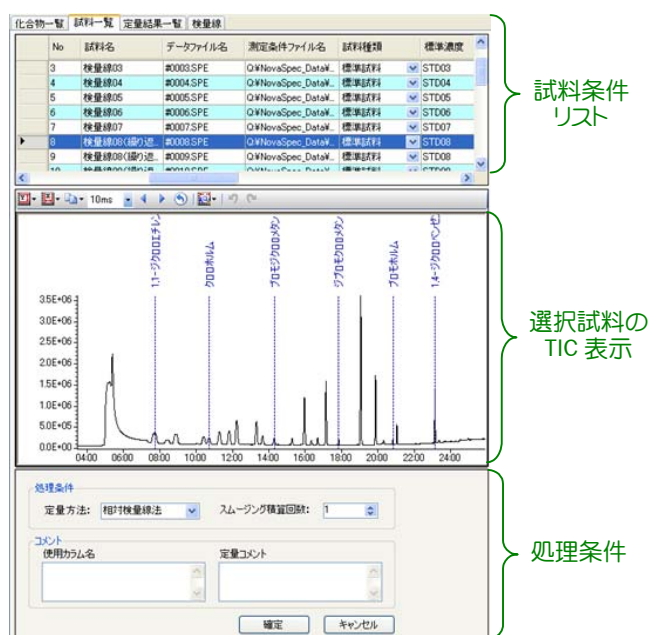


図 4.12

2. 「試料条件リスト」で変更を行う試料を選択し、項目を変更する。

変更ができる項目は、試料名、分析機関、分析者、クライアント、です。

4.3.2b 指定試料のTIC表示

1. 「データ表示エリア」の「試料一覧」タブをクリックする。

2. 「試料条件リスト」でTICを表示する試料を選択する。

「選択試料のTIC表示」に選択試料のTIC（トータルイオンクロマト）が表示されます。

TIC上にはピーク判定を行った化合物名も表示されます。

TICツールバーによりTICの表示を調整することができます。

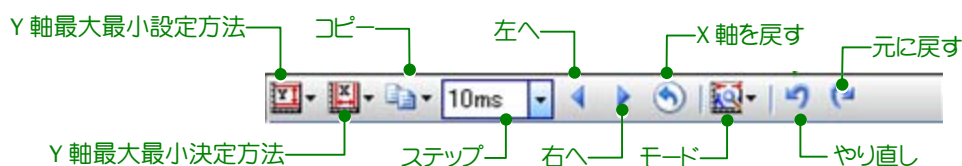


図 4.13

Y軸最大最小設定方法：表示する強度範囲の設定方法をプルダウンリストより選択します。以下の方法が選択可能です。

- 自動設定（最大）
最大値を「Y軸最大最小値決定範囲」で選択した方法で求め設定します。最小値は常に0です。
- 自動設定（最大最小）
最大値最小値を、「Y軸最大最小値決定範囲」で選択した方法で求め設定します。
- 手動設定（最大最小）
マウスのクリックにより、Y軸の最大値、最小値を設定します。

Y軸最大最小決定方法：「Y軸最大最小設定方法」が自動のとき、最大値と最小値を決定する方法を、プルダウンリストから選択します。以下の方法が選択可能です。

- 測定時間全体
測定時間の全体で強度の最大最小値を設定します。
- 表示範囲
表示範囲で強度の最大最小値を設定します。

コピー：	表示されているTICをクリップボードにコピーします。
ステップ：	表示領域を左右に移動するときの、1クリックでの移動ステップをプルダウンリストから選択します。
右へ：	表示領域を右へ移動するときにクリックします。
左へ：	表示領域を左へ移動するときにクリックします。
X軸を戻す：	X軸の移動や拡大をキャンセルし表示を元に戻します。
モード：	マウスのモードをプルダウンリストより選択します。以下のモードが選択可能です。

- X軸方向拡大

グラフ上でマウスカーソルが「左右矢印」に変化して、Y軸と平行補助線が表示されます。設定を行うグラフの最小時間でマウスをクリックし、最大時間までドラッグすることにより、設定された時間範囲でグラフが表示されます。

- Y軸最小最大任意設定

グラフ上でマウスカーソルが「上下矢印」に変化して、X軸と平行補助線が表示されます。設定を行うグラフの最大強度位置でマウスをクリックし、最小強度位置までドラッグすることにより、設定された最大最小範囲でグラフが表示されます。

元に戻す： グラフの変更を1つ前に戻します。

やり直し： 「元に戻す」を取り消します。

4.3.2c 処理条件の確認および一部のデータの変更

1. 「データ表示エリア」の「試料一覧」タブをクリックする。
2. 「処理条件」のパラメータ変更後[確定]ボタンをクリックする。
定量値の再計算が行われます。

4.3.3 定量結果一覧

1. 「データ表示エリア」の「定量結果一覧」タブをクリックする。
「データ表示エリア」に定量結果一覧パネルが表示されます。

化合物名	#0001.SPE	#0002.SPE	#0003.SPE	#0004.SPE	#0005.SPE	#0006.SPE	#0007.SPE
1,1-ジクロロエチレン	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.679	5.64
クロロホルム	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.573	0.00
プロモジクロロメタン	0.000	0.000	0.000	0.000	0.012	0.649	5.20
ジプロモクロロメタン	0.000	0.000	0.000	0.000	0.120	0.749	5.20
プロモホルム	0.000	0.000	0.000	0.000	0.282	0.850	5.19
1,4-ジクロロベンゼン	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.501	5.19
p-ブロモフルオロベンゼン							

グループ名	#0001.SPE	#0002.SPE	#0003.SPE	#0004.SPE	#0005.SPE	#0006.SPE	#0007.SPE
軽トリハロメタン	0.000	0.000	0.000	0.000	0.414	2.821	15.60

図4.14

列項目名に測定結果ファイル名が、行項目名に化合物名またはグループ名が表示されます。

2. 表示項目を選択する。

表示項目は以下から選択します。

定量値, 面積値, I/Q比/1, I/Q比2, I/Q比3, I/Q比4, 保持時間実測値。

4.3.4 検量線

4.3.4a 指定化合物の検量線表示

- ◆ 「データ表示エリア」の「検量線」タブをクリックする。

「データ表示エリア」に検量線パネルが表示されます。

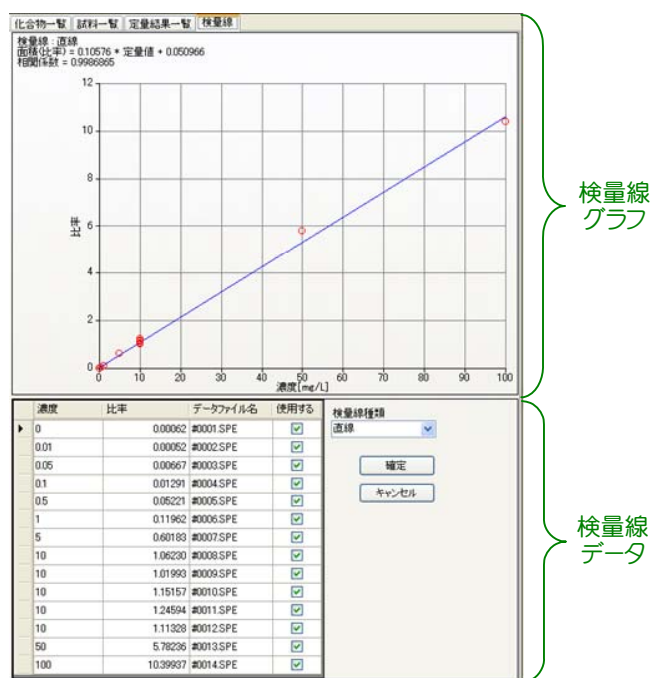


図4.15

目次

「検量線グラフ」には、選択されている化合物の検量線と近似式、相関係数が表示されます。
「検量線データ」には、選択されている化合物の標準試料のデータと検量線種類が表示されます。

内標化合物が選択されたときは、内標の変動グラフを表示します。

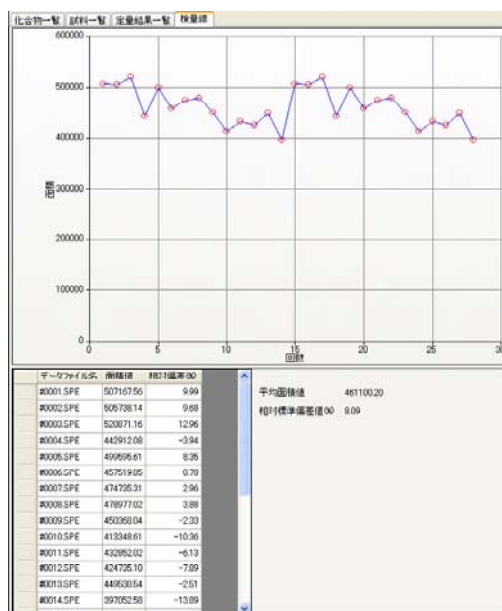


図4.16

4.3.4b 検量線の変更

1. 「データ表示エリア」の「検量線」タブをクリックする。
2. 「検量線データ」で検量線の種類や各検量線データを使用するか否かを設定して[確定]ボタンをクリックする。

検量線に入れたくないデータは、「使用する」チェックを外します。

4.3.5 保持時間予測

4.3.5a 保持時間予測データの表示

- ◆ 「データ表示エリア」の「保持時間予測」タブをクリックする。
「データ表示エリア」に保持時間予測パネルが表示されます。

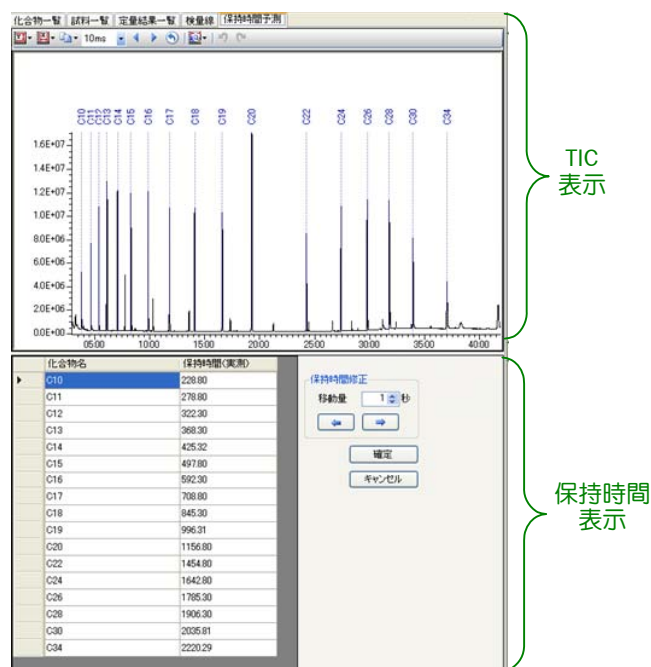


図4.17

「TIC表示」には、選択されている試料のTIC上の実測保持時間位置に、保持時間補正化合物名を表示します。TICは表示を拡大、表示範囲を移動等の操作を行うことができます。操作方法は、「4.2.2」項を参照ください。

「保持時間表示」には、保持時間補正化合物の実測保持時間データと、保持時間補正コントロールが表示されます。

✗ 「保持時間予測」タブは、試料種類に「n-アルカン」を選択したときのみ表示されます。

4.3.5b 保持時間予測データの修正

1. 「データ表示エリア」の「保持時間予測」タブをクリックする。
2. 「保持時間表示」で化合物を指定して、保持時間を変更する。

各化合物の保持時間の変更は、下記の2つの方法で行えます。

- 「保持時間(実測値)」に表示してある保持時間を直接編集する。
- 保持時間を変更したい化合物の「化合物名」をマウスで指定して、「保持時間補正」の左右矢印ボタンで、保持時間を変更する。複数の化合物の選択が可能。

3. [確定]ボタンをクリックする。

変更した保持時間補正化合物の保持時間により、他の化合物の保持時間が補正され、ピーク判定、定量値の再計算等が行われます。

4.3.6 システム適合性

◆ 「データ表示エリア」の「システム適合性」タブをクリックする。

「データ表示エリア」にシステム適合性パネルが、「グラフ表示エリア」にシステム適合性結果グラフが表示されます。

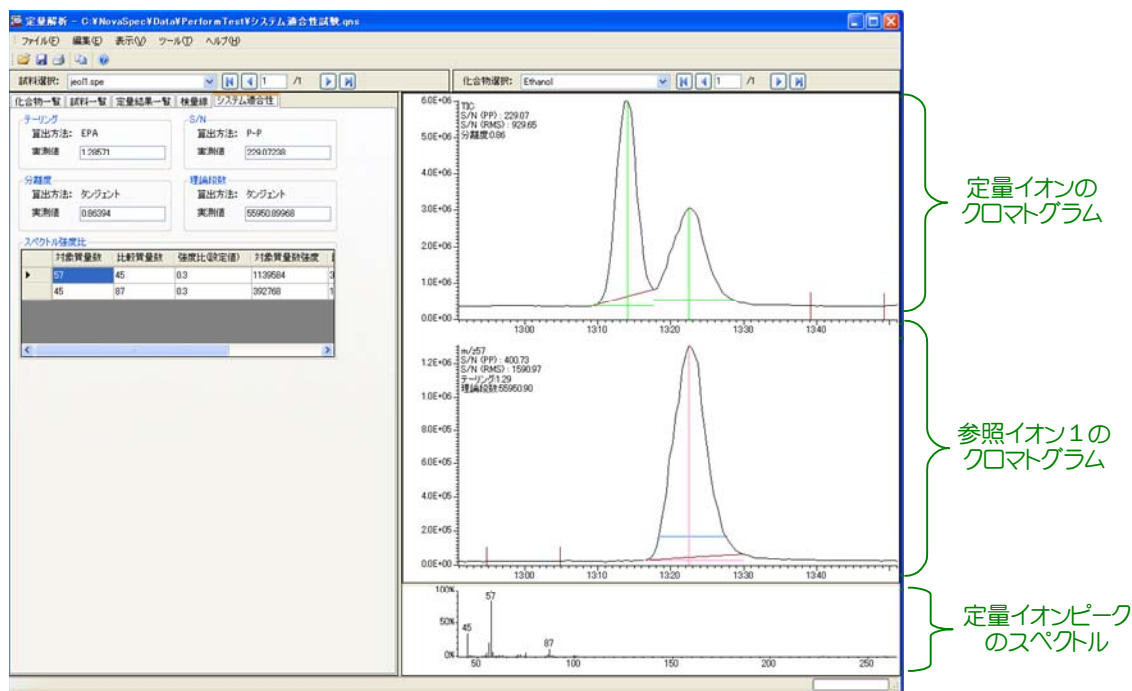


図4.18

次の項目が表示されます。

テーリング:

算出方法: 化合物条件に設定されているテーリングの計算方法を表示します。

実測値: 参照イオン1で算出したテーリング計算結果を表示します。

S/N:

算出方法: 化合物条件に設定されているS/Nの計算方法を表示します。

実測値: 定量イオンで算出したS/N計算結果を表示します。

分離度:

算出方法: 化合物条件に設定されている分離度の計算方法を表示します。

実測値: 定量イオンで算出した分離度計算結果を表示します。

理論段数:

算出方法: 化合物条件に設定されている理論段数の計算方法を表示します。

実測値: 参照イオン1で算出した理論段数計算結果を表示します。

スペクトル強度比:

対象質量数: 強度比を算出するときの分母になる質量数の設定値を表示します。

比較質量数: 強度比を算出するときの分子になる質量数の設定値を表示します。

強度比(設定値): 強度比の設定値を表示します。

対象質量数強度: 対象質量数の強度の実測値を表示します。

比較質量数強度: 比較質量数の強度の実測値を表示します。

強度比(実測値): 強度比の実測値を表示します。

✂ 「システム適合性」タブは試料種類に「性能テスト」を選択したときのみ表示されます。

4.4 グラフの表示

4.4.1 1検体1成分表示

4.4.1a 表示方法

- ◆ 「グラフ表示エリア」の「1検体1成分」タブをクリックする。

「グラフ表示エリア」に、定量イオンと参照イオン1～4に登録されたマスクロマトグラムと定量イオンピークのスペクトル(未知スペクトル)が表示されます。また表示オプションの設定により、参照スペクトル(NISTライブラリから取得する。)と差分スペクトル(未知スペクトルと参照スペクトルの差分)を表示します。表示オプションの設定方法は4.4.5を参照ください。

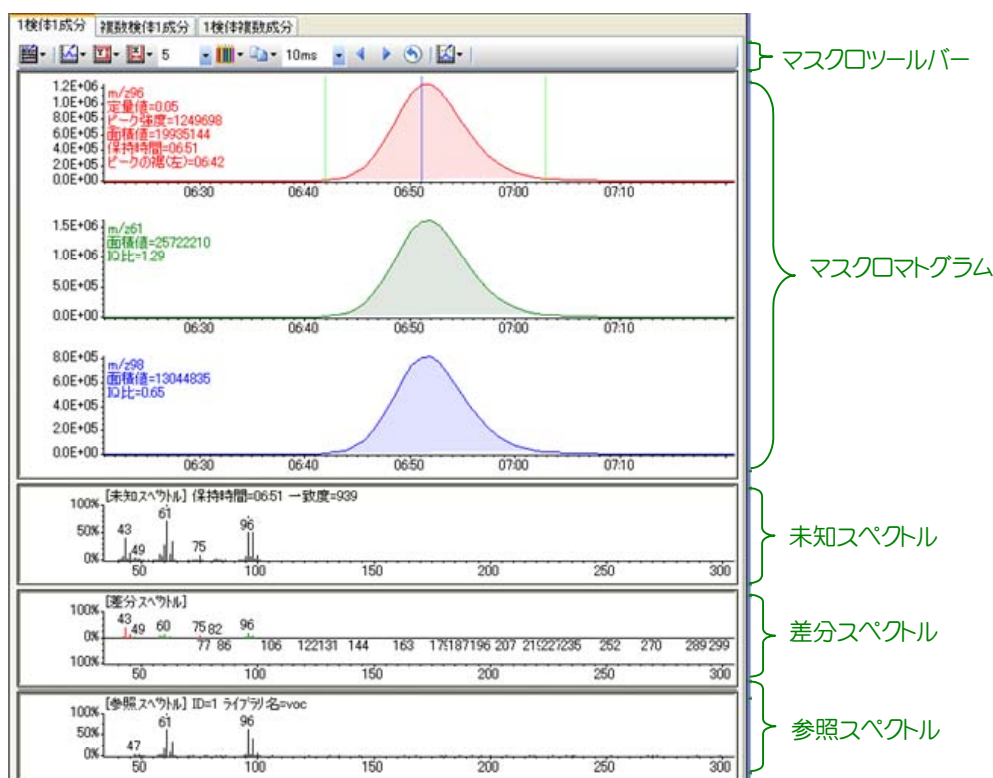


図4.19

表示の変更等はクロマトツールバーで行います。



図4.20

4.4.1b 表示アイテムの選択

1. マスクロツールバーの「表示切替」ボタンをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。現在表示されているアイテムにはチェックマークが付きます。



図4.21

2. 表示ON/OFFを行うアイテム上でクリックを解除する。
指定したアイテムが表示または非表示になります。

4.4.1c 表示方法の変更

- ◆ マスクロツールバーの「クロマト表示方法」ボタンをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。3種類の表示方法が選択できます。現在選択されている方法にチェックが付いています。

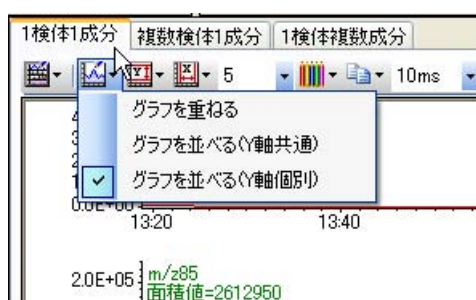


図4.22

- グラフを重ねる

登録してあるすべてのイオンのマスクロマトグラムを重ねて表示します。

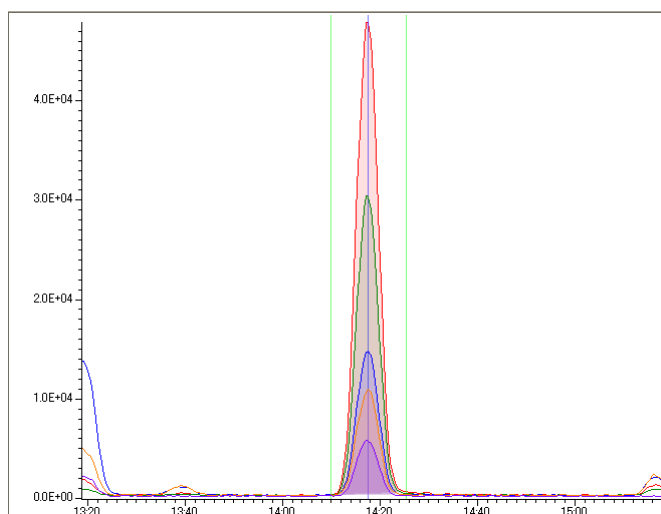


図4.23

- グラフを並べる(Y軸共通)

登録してあるすべてのイオンのマスクロマトグラムを縦に並べて表示します。Y軸の最大値は共通になります。

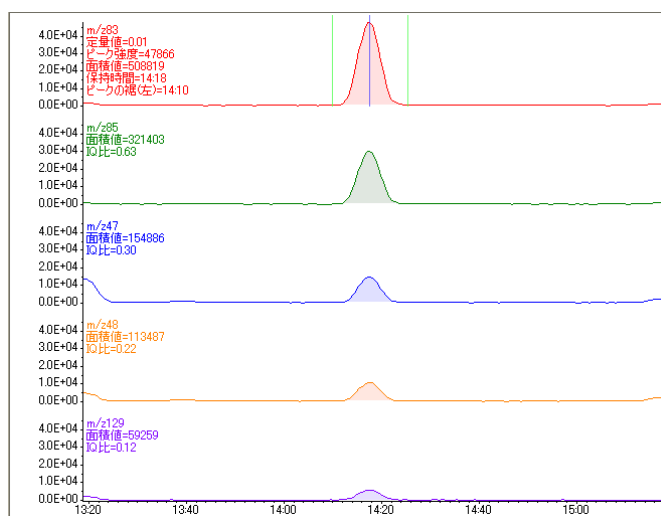


図4.24

- グラフを並べる(Y軸個別)

登録してあるすべてのイオンのマスクロマトグラムを縦に並べて表示します。Y軸の最大値はグラフ個別になります。

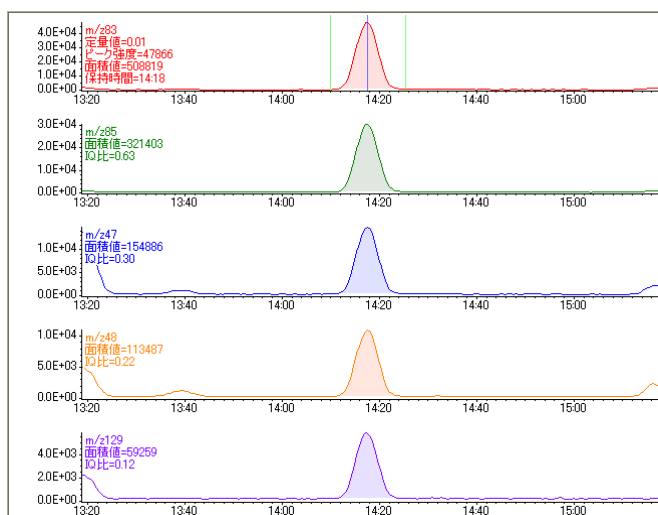


図4.25

4.4.1d 同時表示数の設定

- ◆ マスクツールバーの「クロマト同時表示数」コンボボックスをクリックする。プルダウンリストが表示されます。同時に表示できるグラフの数を選択します。選択できる数は「1～登録参照イオン数+1」です。

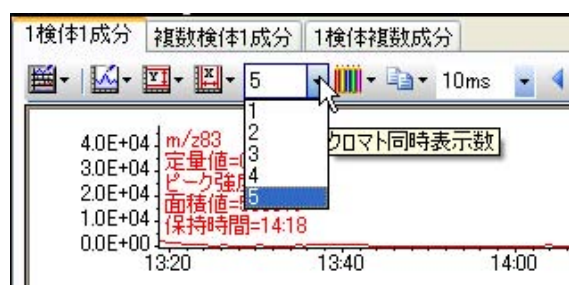


図4.26

表示数を超えるグラフが登録されているときは、スクロールバーの移動で上下のグラフを表示できます。

4.4.1e 表示強度範囲の自動設定

1. マスクロツールバーの「Y軸最大最小値決定範囲」ボタンをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。4種類の方法が選択できます。現在選択されている方法にチェックが付いています。

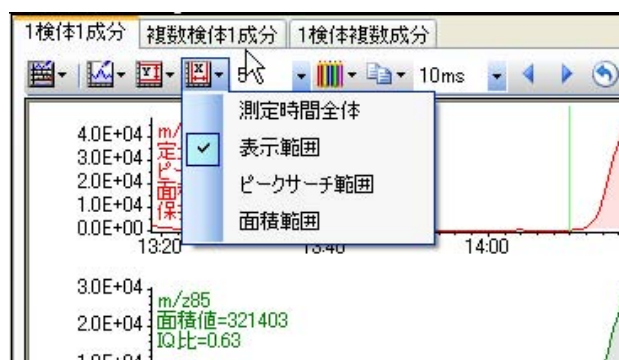


図4.27

- 測定時間全体
測定時間の全体で強度の最大最小値を設定します。
 - 表示範囲
表示範囲で強度の最大最小値を設定します。
 - ピークサーチ範囲
ピークサーチ範囲で強度の最大最小値を設定します。
 - 面積範囲
面積範囲で強度の最大最小値を設定します。
2. マスクロツールバーの「Y軸最大最小値設定方法」ボタンをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。自動設定は2種類の方法が選択できます。現在選択されている方法にチェックが付いています。

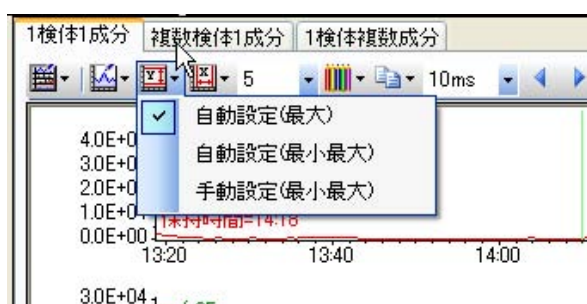


図4.28

- 自動設定(最大)
最大値を「Y軸最大最小値決定範囲」で選択した方法で求め設定します。最小値は常に0です。
- 自動設定(最大最小)
最大値最小値を、「Y軸最大最小値決定範囲」で選択した方法で求め設定します。

4.4.1f 表示強度範囲の手動設定

1. マスクロツールバーの「Y軸最大最小値設定方法」ボタンをクリックし「手動設定（最大最小）」を選択する。
2. マスクロツールバーの「モード」ボタンをクリックし、「Y軸最大最小任意設定」を選択する。

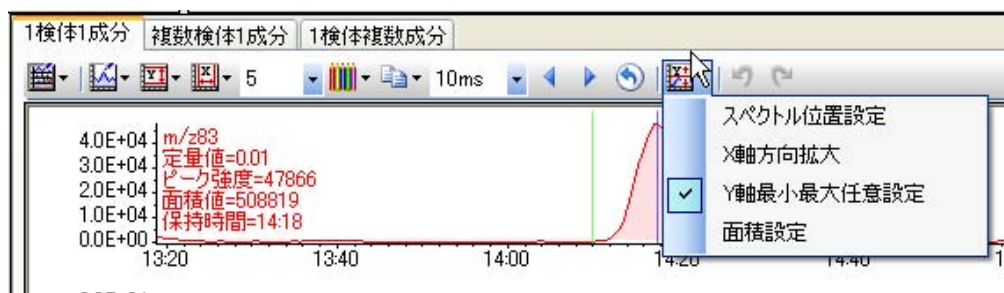


図4.29

グラフ上でマウスカーソルが「上下矢印」に変化して、X軸と平行補助線が表示されます。

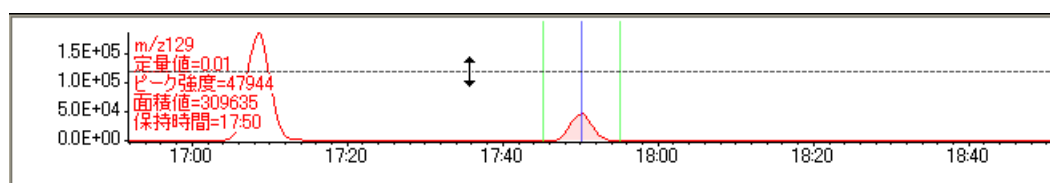


図4.30

3. 設定を行うグラフの最大強度位置でマウスをクリックし、最小強度位置までドラッグする。

設定された最大最小範囲でグラフが表示されます。

 マスクロツールバーの「モード」ボタンで、「Y軸最大最小任意設定」を選択すると、クロマトツールバーは下図のようになります。

「元に戻す」ボタンをクリックすると、最大最小範囲を設定する前の表示に戻ります。

「やり直し」ボタンをクリックすると、「元に戻す」操作が取り消されます。

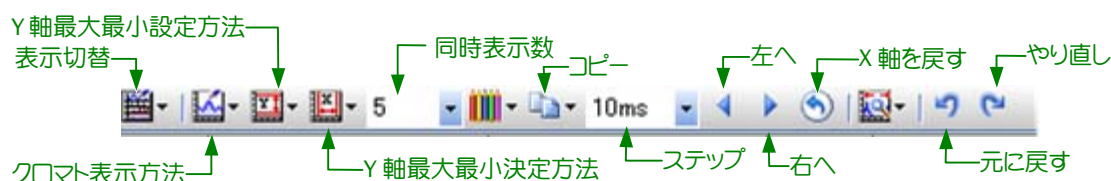


図4.31

4.4.1g 表示時間範囲の設定

1. マスクツールバーの「モード」ボタンをクリックし、「X軸方向拡大」を選択する。

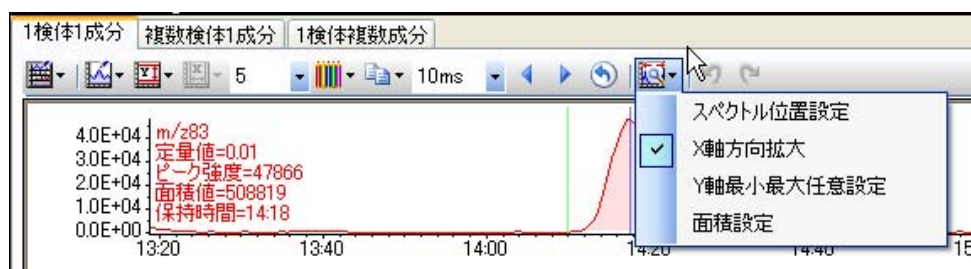


図4.32

グラフ上でマウスカーソルが「左右矢印」に変化して、Y軸と平行補助線が表示されます。

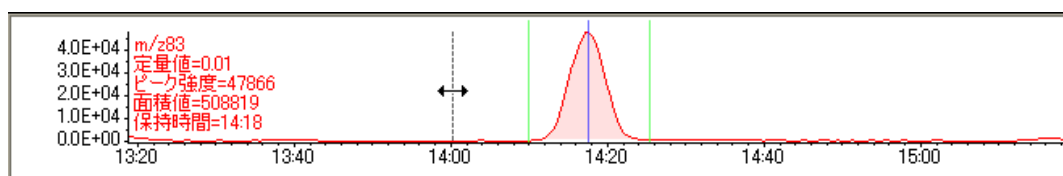


図4.33

2. 設定を行うグラフの最小時間でマウスをクリックし、最大時間までドラッグする。
設定された時間範囲でグラフが表示されます。

4.4.1h 表示時間範囲の移動

1. マスクツールバーの「移動量」コンボボックスをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。「右へ」ボタンまたは「左へ」ボタンの1クリックでの移動量を選択します。



図4.34

2. マスクツールバーの「右へ」ボタンまたは「左へ」ボタンをクリックする。
設定した移動量、表示領域が左右に移動します。
 マスクツールバーの「X軸を戻す」ボタンをクリックすると、表示領域の位置が初期状態に戻ります。

4.4.1i 面積設定(データ間を結ぶ)

1. マスクロツルバーの「モード」ボタンをクリックし、「面積設定」を選択する。

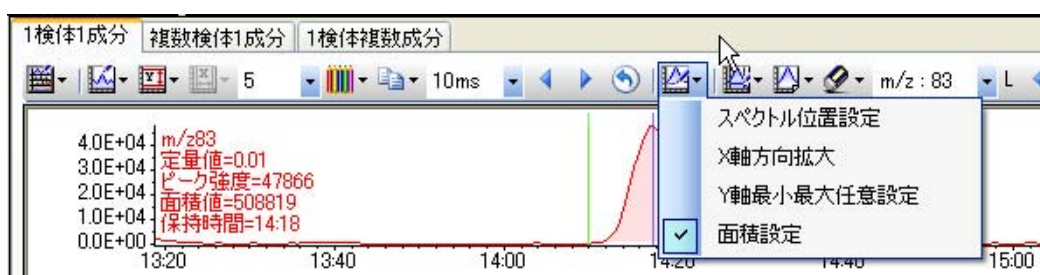


図4.35

クロマトツルバーは下図のように変化します。

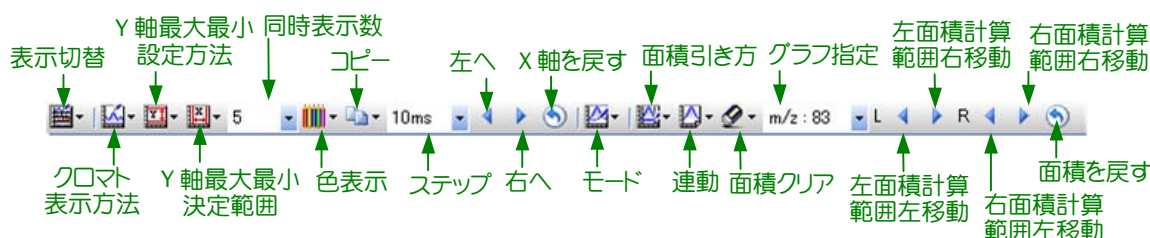


図4.36

2. マスクロツルバーの「面積引き方」ボタンをクリックし、「データ間を結ぶ線を引き」を選択する。

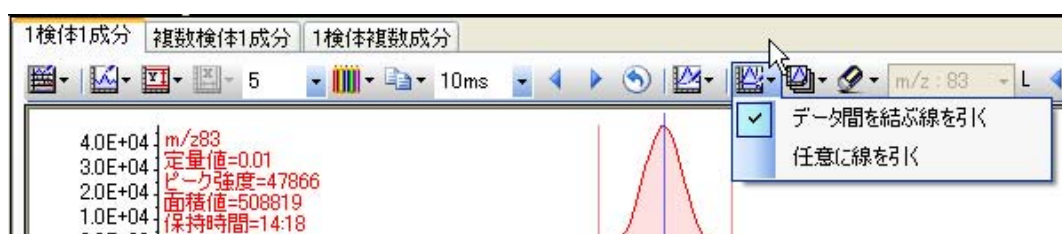


図4.37

グラフ内でマウスカーソルを動かすと、マウスカーソルの直近のデータ取得ポイントを0点とする十字の補助線を表示します。

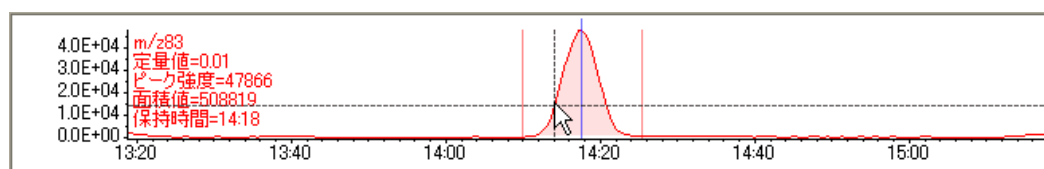


図4.38

3. マスクロツールバーの「連動」ボタンをクリックする。

プルダウンリストが表示されます。

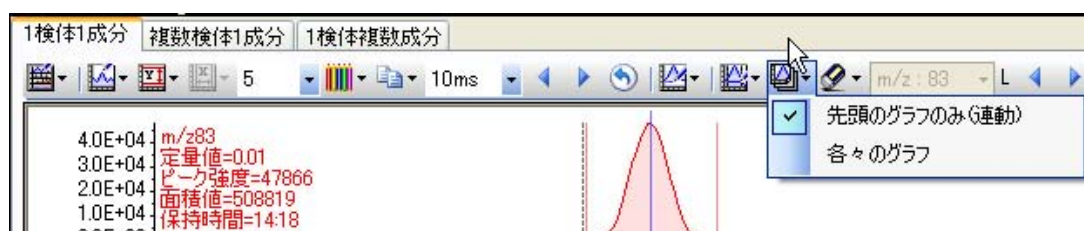


図4.39

- 先頭のグラフのみ(連動)

先頭のグラフ(定量イオン)で引いた面積の時間範囲が, 先頭以外のグラフ(参照イオン)にも適用されます。補助線は先頭グラフにのみ表示されます。

- 各々のグラフ

グラフそれぞれで面積を設定できます。

4. マスクロツールバーの面積調整用ボタンまたはマウスにより面積設定を行う。

面積設定は, マスクロツールバーまたはマウスを使用して行います。

- マスクロツールバーを利用

マスクロツールバーの「左面積計算範囲左移動」ボタン, 「左面積計算範囲右移動」ボタン, 「右面積計算範囲左移動」ボタン, 「右面積計算範囲右移動」ボタンにより面積範囲の調整を行います。「左面積計算範囲左移動」ボタン, 「左面積計算範囲右移動」ボタンで左側バーが, 「右面積計算範囲左移動」ボタン, 「右面積計算範囲右移動」ボタンで右側バーが移動します。前期各ボタンを1クリックすると, 1データポイント左右に移動します。

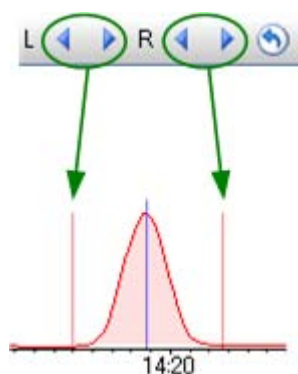


図4.40

 手順③で「各々のグラフ」を指定した場合は, クロマトツールバーの「グラフ指定」コンボボックスで, 面積調整を行うグラフを指定します。

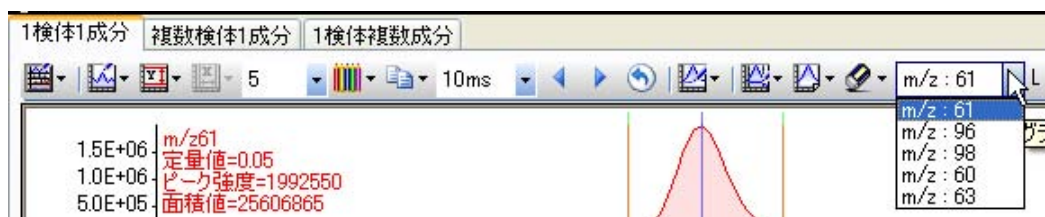


図 4.41

- マウスを利用

左右のバーをマウスの左ボタンでドラッグすることにより面積範囲の調整を行います。

 マスクツールバーの「面積を戻す」ボタンをクリックすると、面積範囲が初期状態に戻ります。

4.4.1j 面積設定 (任意点間を結ぶ)

1. マスクツールバーの「モード」ボタンをクリックし、「面積設定」を選択する。
2. マスクツールバーの「面積引き方」ボタンをクリックし、「任意に線を引く」を選択する。

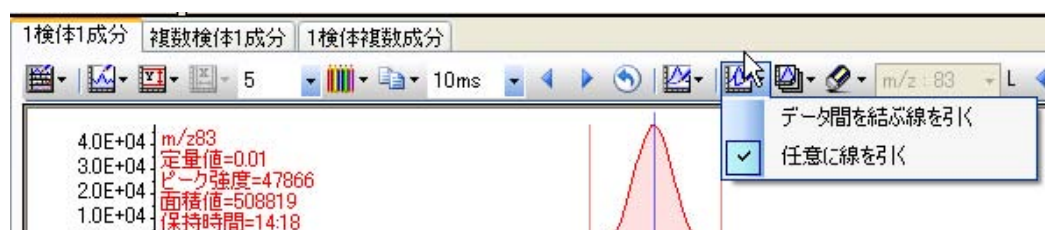


図 4.42

グラフ内でマウスカーソルを動かすと、マウスカーソルの直近のデータ取得ポイント(強度は任意の位置を設定可能)を0点とする十字の補助線を表示します。

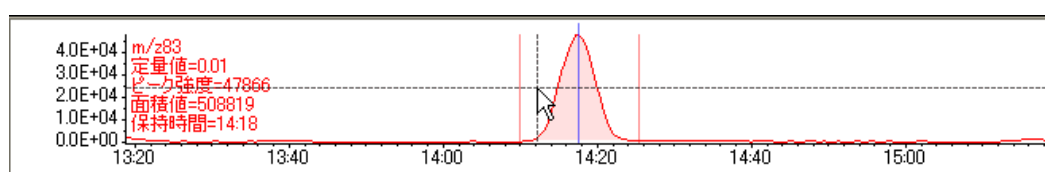


図 4.43

3. マスクツールバーの「連動」ボタンをクリックする。

プルダウンリストが表示されます。

- 先頭のグラフのみ (連動)

先頭のグラフ (定量イオン) で引いた面積の時間範囲が、先頭以外のグラフ (参照イオン) にも適用されます。補助線は先頭グラフにのみ表示されます。

- 各々のグラフ

グラフそれぞれで面積を設定できます。

4. マスクツールバーの面積調整用ボタンまたはマウスにより面積設定を行う。

4.4.1k スペクトル表示設定

1. マスクロツツールバーの「モード」ボタンをクリックし、「スペクトル位置設定」を選択する。

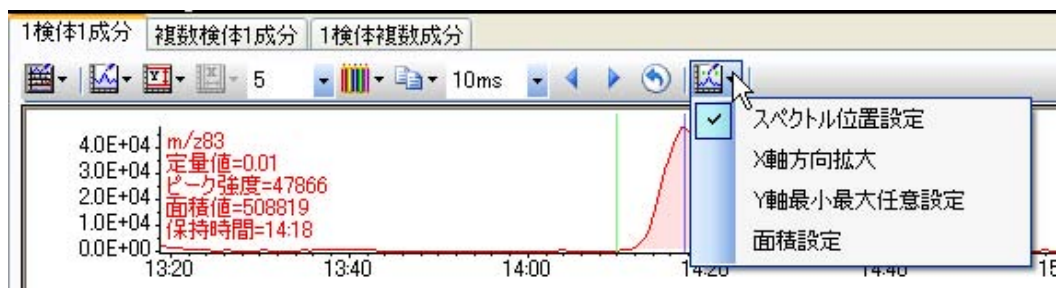


図4.44

グラフ内でマウスカーソルは上矢印に変化します。

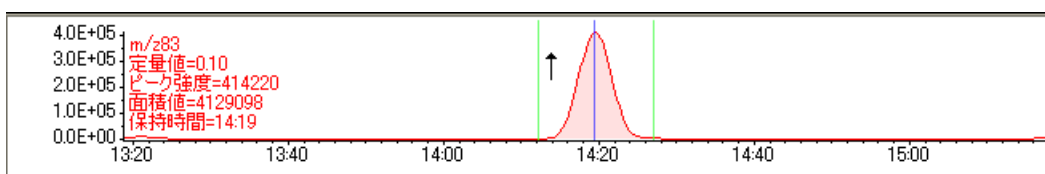


図4.45

2. マウスの左ボタンでスペクトル表示位置を, マウスの右ボタンで差し引く/バックグラウンドを指定する。

マウスの左ボタンでグラフ上をクリックするとその位置に青線が引かれます。マウスの右ボタンでグラフ上をクリックするとその位置に緑線が引かれます。緑線は青線の左右に1本ずつ指定できます。青線の位置のスペクトルが「未知スペクトル」に表示されます。グラフの左側スケール部分でマウスをクリックすると、スペクトル位置設定が解除されます。

4.4.1l 表示色設定

1. マスクロツツールバーの「クロマトカラー選択」ボタンをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。

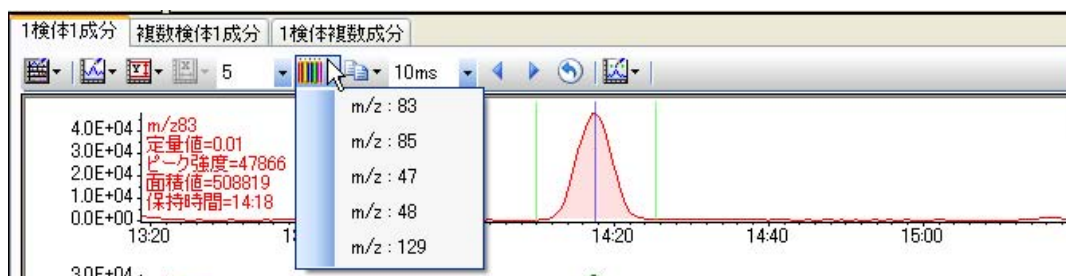


図4.46

色を変更するグラフの質量を選択します。色の設定画面が表示されます。



図 4.47

2. 「基本色」から色を選択し[OK]ボタンをクリックする。
グラフが選択した色に変更されます。

4.4.1m クリップボードへコピー

1. マスクツールバーの「クリップボードへコピー」ボタンをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。

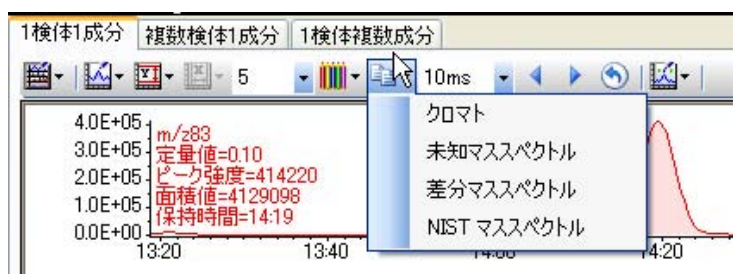


図 4.48

2. コピーしたいグラフを選択する。
選択したグラフがクリップボードへコピーされます。

4.4.2 複数検体1成分表示

4.4.2a 表示方法

1. 「グラフ表示エリア」の「複数検体1成分」タブをクリックする。
2. メニューの「表示(V)」-「複数検体1成分(S)」をクリックする。
複数検体1成分表示登録画面が表示されます。



図4.49

3. クロマトグラムを表示する測定結果ファイルを登録する。

「登録リスト」に登録されたファイルが表示されます。

- | | |
|----------|--|
| すべて追加>>: | 「未登録リスト」のすべてのファイルを「登録リスト」に登録します。 |
| 追加>: | 「未登録リスト」で選択されたファイルを「登録リスト」に登録します。 |
| <<すべて削除: | 「登録リスト」のすべてのファイルの登録を解除して「未登録リスト」に表示します。 |
| <削除: | 「登録リスト」の選択されたファイルの登録を解除して「未登録リスト」に表示します。 |
| 上に移動: | 「登録リスト」の選択されたファイルを1つ上に移動します。 |
| 下に移動: | 「登録リスト」の選択されたファイルを1つ下に移動します。 |

4. 登録後[OK]ボタンをクリックする。

「グラフ表示エリア」に、登録したファイルの選択した化合物の定量イオンマスキロマトグラムを表示します。

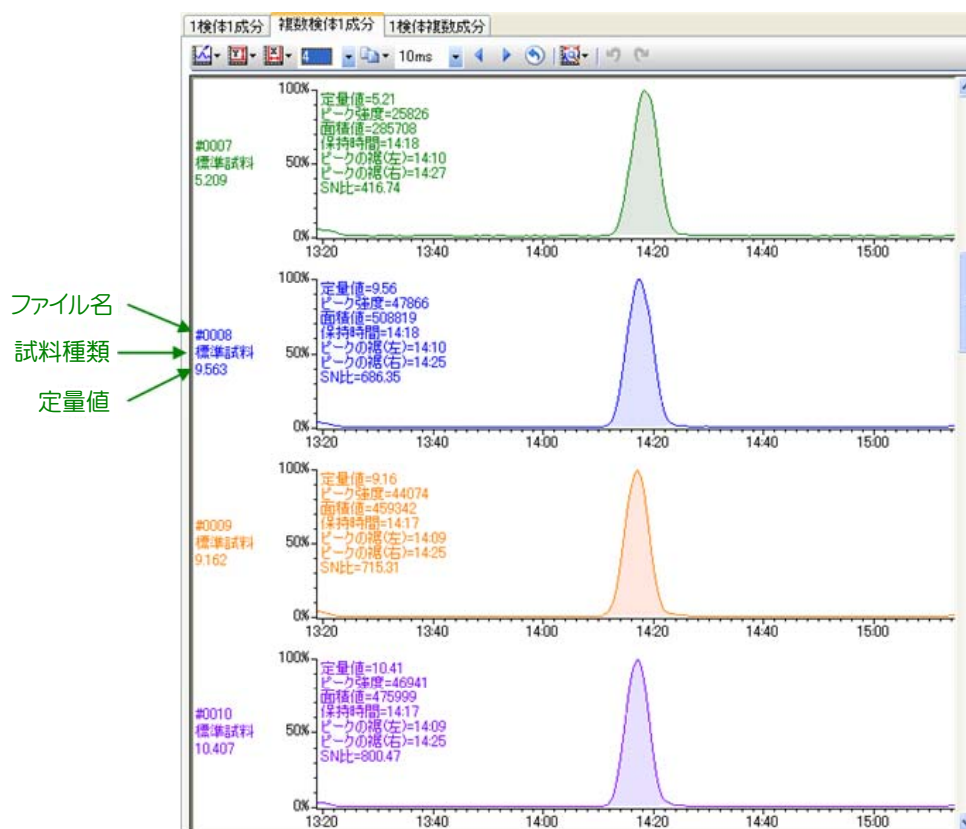


図4.50

表示の変更等はクロマトツールバーで行います。



図4.51

4.4.2b 表示方法の変更

- ◆ マスクロツールバーの「クロマト表示方法」ボタンをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。3種類の表示方法が選択できます。現在選択されている方法にチェックが付いています。

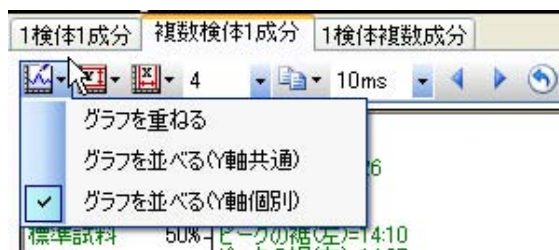


図4.52

- グラフを重ねる
登録してあるファイルの定量イオンのマスクロマトグラムを重ねて表示します。
- グラフを並べる(Y軸共通)
登録してあるファイルの定量イオンのマスクロマトグラムを縦に並べて表示します。Y軸の最大値は共通になります。
- グラフを並べる(Y軸個別)
登録してあるファイルの定量イオンのマスクロマトグラムを縦に並べて表示します。Y軸の最大値はグラフ個別になります。

4.4.2c 同時表示数の設定

- ◆ マスクロツールバーの「クロマト同時表示数」コンボボックスをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。同時に表示できるグラフの数を選択します。選択できる数は「1～登録試料数」です。

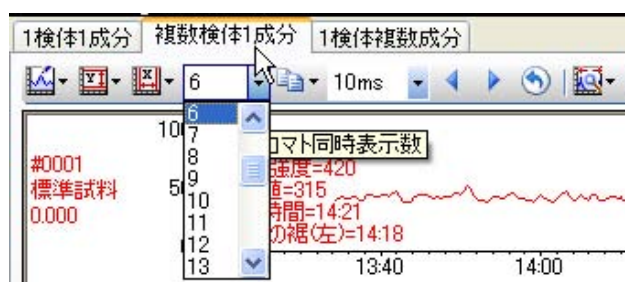


図4.53

表示数を超えるグラフが登録されているときは、スクロールバーの移動で上下のグラフを表示できます。

4.4.2d 表示強度範囲の自動設定

1. マスクロツツールバーの「Y軸最大最小値決定範囲」ボタンをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。4種類の方法が選択できます。現在選択されている方法にチェックが付いています。

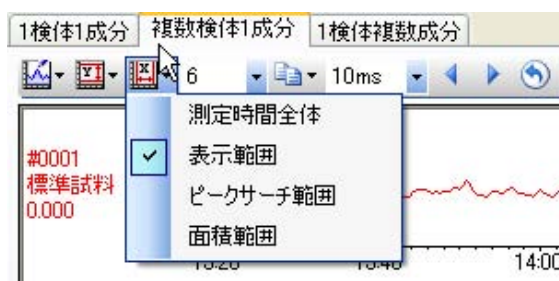


図 4.54

- 測定時間全体
測定時間の全体で強度の最大最小値を設定します。
- 表示範囲
表示範囲で強度の最大最小値を設定します。
- ピークサーチ範囲
ピークサーチ範囲で強度の最大最小値を設定します。
- 面積範囲
面積範囲で強度の最大最小値を設定します。

2. マスクロツツールバーの「Y軸最大最小値設定方法」ボタンをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。自動設定は2種類の方法が選択できます。現在選択されている方法にチェックが付いています。

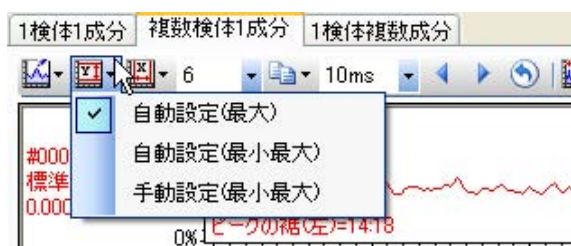


図 4.55

- 自動設定(最大)
最大値を「Y軸最大最小値決定範囲」で選択した方法で求め設定します。最小値は常に0です。
- 自動設定(最大最小)
最大値最小値を、「Y軸最大最小値決定範囲」で選択した方法で求め設定します。

4.4.2e 表示強度範囲の手動設定

1. マスクロツールバーの「Y軸最大最小値設定方法」ボタンをクリックし「手動設定（最大最小）」を選択する。
2. マスクロツールバーの「モード」ボタンをクリックし、「Y軸最大最小任意設定」を選択する。



図4.56

グラフ上でマウスカーソルが「上下矢印」に変化して、X軸と平行補助線が表示されます。

3. 設定を行うグラフの最大強度位置でマウスをクリックし、最小強度位置までドラッグする。

設定された最大最小範囲でグラフが表示されます。

マスクロツールバーの「モード」ボタンで、「Y軸最大最小任意設定」を選択すると、クロマトツールバーは下図のようになります。

「元に戻す」ボタンをクリックすると、最大最小範囲を設定する前の表示に戻ります。

「やり直し」ボタンをクリックすると、「元に戻す」操作が取り消されます。



図4.57

4.4.2f 表示時間範囲の設定

1. マスクロツールバーの「モード」ボタンをクリックし、「X軸方向拡大」を選択する。



図4.58

グラフ上でマウスカーソルが「左右矢印」に変化して、Y軸と平行補助線が表示されます。

2. 設定を行うグラフの最小時間でマウスをクリックし、最大時間までドラッグする。
- 設定された時間範囲でグラフが表示されます。

4.4.2g 表示時間範囲の移動

1. マスクロツールバーの「移動量」コンボボックスをクリックする。

プルダウンリストが表示されます。「右へ」ボタンまたは「左へ」ボタンの1クリックでの移動量を選択します。



図4.59

2. マスクロツールバーの「右へ」ボタンまたは「左へ」ボタンをクリックする。

設定した移動量, 表示領域が左右に移動します。

 マスクロツールバーの「X軸を戻す」ボタンをクリックすると, 表示領域の位置が初期状態に戻ります。

4.4.2h 面積設定 (データ間を結ぶ)

1. マスクロツールバーの「モード」ボタンをクリックし, 「面積設定」を選択する。

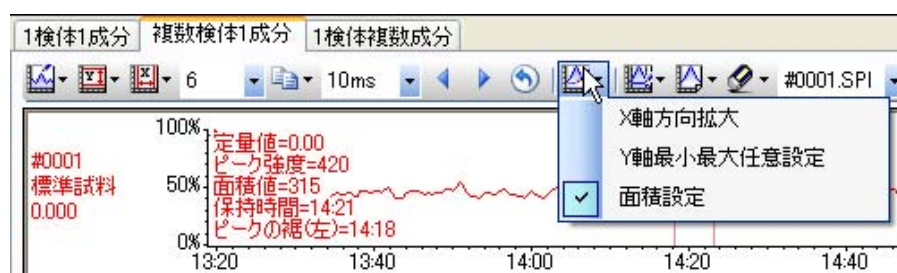


図4.60

クロマトツールバーは下図のように変化します。

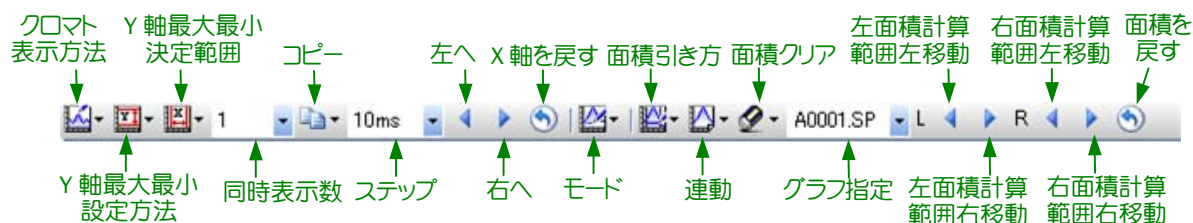


図4.61

2. マスクロツツールバーの「面積引き方」ボタンをクリックし、「データ間を結ぶ線を引く」を選択する。

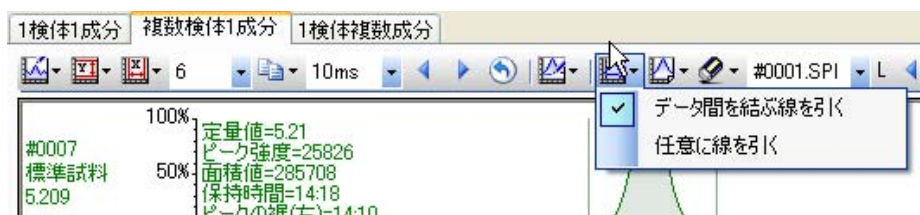


図4.62

グラフ内でマウスカーソルを動かすと、マウスカーソルの直近のデータ取得ポイントを0点とする十字の補助線を表示します。

3. マスクロツツールバーの「連動」ボタンをクリックする。

プルダウンリストが表示されます。

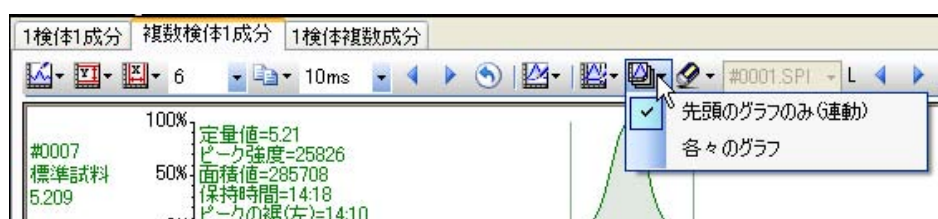


図4.63

- 先頭のグラフのみ(連動)

先頭に登録されたグラフで引いた面積の時間範囲が、先頭以外のグラフにも適用されます。補助線は先頭グラフにのみ表示されます。

- 各々のグラフ

グラフそれぞれで面積を設定できます。

4. マスクロツツールバーの面積調整用ボタンまたはマウスにより面積設定を行う。

面積設定は、マスクロツツールバーまたはマウスを使用して行います。

- マスクロツツールバーを利用

マスクロツツールバーの「左面積計算範囲左移動」ボタン、「左面積計算範囲右移動」ボタン、「右面積計算範囲左移動」ボタン、「右面積計算範囲右移動」ボタンにより面積範囲の調整を行います。「左面積計算範囲左移動」ボタン、「左面積計算範囲右移動」ボタンで左側バーが、「右面積計算範囲左移動」ボタン、「右面積計算範囲右移動」ボタンで右側バーが移動します。前期各ボタンを1クリックすると、1データポイント左右に移動します。

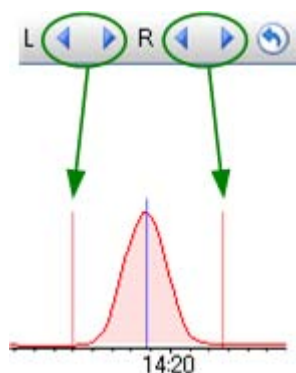


図4.64

手順3で「各々のグラフ」を指定した場合は、クロマトツールバーの「グラフ指定」コンボボックスで、面積調整を行うグラフを指定します。



図4.65

- マウスを利用

左右のバーをマウスの左ボタンでドラッグすることにより面積範囲の調整を行います。

マスコツールバーの「面積を戻す」ボタンをクリックすると、面積範囲が初期状態に戻ります。

4.4.2i 面積設定 (任意点間を結ぶ)

1. マスコツールバーの「モード」ボタンをクリックし、「面積設定」を選択する。
2. マスコツールバーの「面積引き方」ボタンをクリックし、「任意に線を引く」を選択する。



図4.66

グラフ内でマウスカーソルを動かすと、マウスカーソルの直近のデータ取得ポイント(強度は任意の位置を設定可能)を0点とする十字の補助線を表示します。

3. マスクロツールバーの「連動」ボタンをクリックする。

プルダウンリストが表示されます。

- 先頭のグラフのみ(連動)

先頭に登録されたグラフで引いた面積の時間範囲が, 先頭以外のグラフ(参照イオン)にも適用されます。補助線は先頭グラフにのみ表示されます。

- 各々のグラフ

グラフそれぞれで面積を設定できます。

4. マスクロツールバーの面積調整用ボタンまたはマウスにより面積設定を行う。

4.4.2j クリップボードへコピー

- ◆ マスクロツールバーの「クリップボードへコピー」ボタンをクリックし, 「クロマト」を選択する。

表示されているクロマトグラムが, クリップボードにコピーされます。

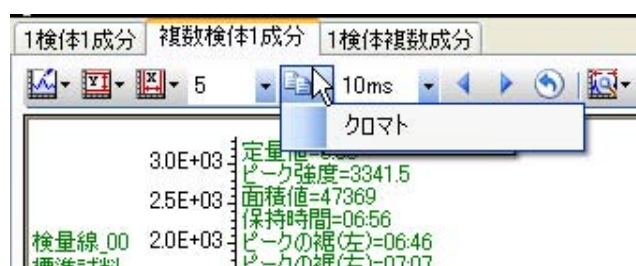


図4.67

4.4.3 1検体複数成分表示

4.4.3a 表示方法

1. 「グラフ表示エリア」の「1検体複数成分」タブをクリックする。
2. メニューの[表示(V)]-[1検体複数成分(C)]をクリックする。

1検体複数成分表示登録画面が表示されます。



図4.68

3. クロマトグラムを表示する化合物を登録する。

「登録リスト」に登録された化合物が表示されます。

すべて追加>> 「未登録リスト」のすべての化合物を「登録リスト」に登録します。

追加: 「未登録リスト」で選択された化合物を「登録リスト」に登録します。

<<すべて削除: 「登録リスト」のすべての化合物の登録を解除して「未登録リスト」に表示します。

<削除: 「登録リスト」の選択された化合物の登録を解除して「未登録リスト」に表示します。

上に移動: 「登録リスト」の選択された化合物を1つ上に移動します。

下に移動: 「登録リスト」の選択された化合物を1つ下に移動します。

4. 登録後[OK]ボタンをクリックする。

「グラフ表示エリア」に、登録した化合物の選択したファイルの定量イオンマスキロマトグラムを表示します。

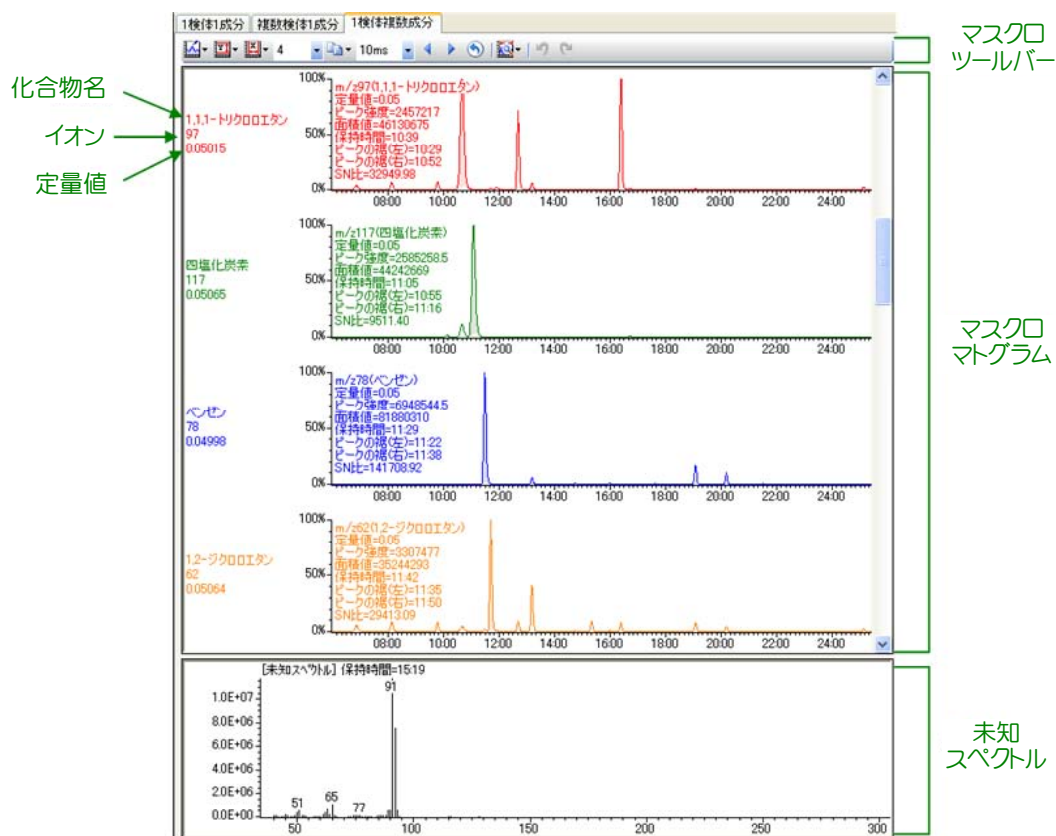


図 4.69

表示の変更等はクロマトツールバーで行います。

デフォルトの表示範囲(時間範囲)は、登録してある化合物すべてを表示範囲を含む範囲となります。



図4.70

4.4.3b 表示方法の変更

- ◆ マスクロツールバーの「クロマト表示方法」ボタンをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。3種類の表示方法が選択できます。現在選択されている方法にチェックが付いています。

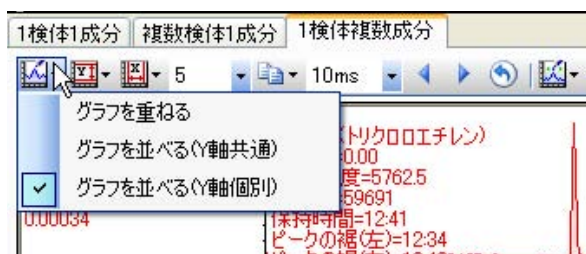


図4.71

- グラフを重ねる
登録してある化合物の定量イオンのマスクロマトグラムを重ねて表示します。
- グラフを並べる(Y軸共通)
登録してある化合物の定量イオンのマスクロマトグラムを縦に並べて表示します。Y軸の最大値は共通になります。
- グラフを並べる(Y軸個別)
登録してある化合物の定量イオンのマスクロマトグラムを縦に並べて表示します。Y軸の最大値はグラフ個別になります。

4.4.3c 同時表示数の設定

- ◆ マスクロツールバーの「クロマト同時表示数」コンボボックスをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。同時に表示できるグラフの数を選択します。選択できる数は「1～登録化合物数」です。



図4.72

表示数を超えるグラフが登録されているときは、スクロールバーの移動で上下のグラフを表示できます。

4.4.3d 表示強度範囲の自動設定

1. マスクロツールバーの「Y軸最大最小値決定範囲」ボタンをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。4種類の方法が選択できます。現在選択されている方法にチェックが付いています。

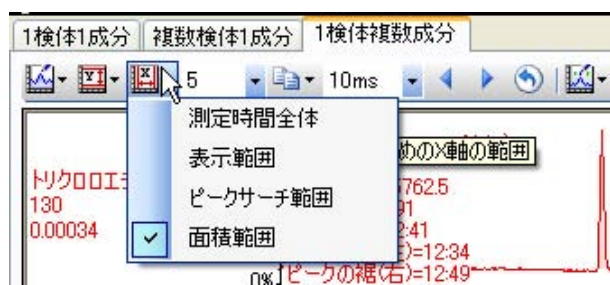


図4.73

- 測定時間全体
測定時間の全体で強度の最大最小値を設定します。
- 表示範囲
表示範囲で強度の最大最小値を設定します。
- ピークサーチ範囲
ピークサーチ範囲で強度の最大最小値を設定します。
- 面積範囲
面積範囲で強度の最大最小値を設定します。

2. マスクロツールバーの「Y軸最大最小値設定方法」ボタンをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。自動設定は2種類の方法が選択できます。現在選択されている方法にチェックが付いています。

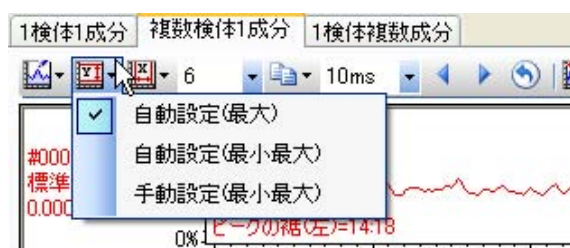


図4.74

- 自動設定(最大)
最大値を「Y軸最大最小値決定範囲」で選択した方法で求め設定します。最小値は常に0です。
- 自動設定(最大最小)
最大値最小値を、「Y軸最大最小値決定範囲」で選択した方法で求め設定します。

4.4.3e 表示強度範囲の手動設定

1. マスクロツールバーの「Y軸最大最小値設定方法」ボタンをクリックし「手動設定（最大最小）」を選択する。
2. マスクロツールバーの「モード」ボタンをクリックし、「Y軸最大最小任意設定」を選択する。



図4.75

グラフ上でマウスカーソルが「上下矢印」に変化して、X軸と平行補助線が表示されます。

3. 設定を行うグラフの最大強度位置でマウスをクリックし、最小強度位置までドラッグする。

設定された最大最小範囲でグラフが表示されます。

マスクロツールバーの「モード」ボタンで、「Y軸最大最小任意設定」を選択すると、クロマトツールバーは下図のようになります。

「元に戻す」ボタンをクリックすると、最大最小範囲を設定する前の表示に戻ります。

「やり直し」ボタンをクリックすると、「元に戻す」操作が取り消されます。



図4.76

4.4.3f 表示時間範囲の設定

1. マスクロツールバーの「モード」ボタンをクリックし、「X軸方向拡大」を選択する。



図4.77

グラフ上でマウスカーソルが「左右矢印」に変化して、Y軸と平行補助線が表示されます。

2. 設定を行うグラフの最小時間でマウスをクリックし、最大時間までドラッグする。

設定された時間範囲でグラフが表示されます。

4.4.3g 表示時間範囲の移動

1. マスクロツールバーの「移動量」コンボボックスをクリックする。

プルダウンリストが表示されます。「右へ」ボタンまたは「左へ」ボタンの1クリックでの移動量を選択します。



図4.78

2. マスクロツールバーの「右へ」ボタンまたは「左へ」ボタンをクリックする。

設定した移動量, 表示領域が左右に移動します。

☒ マスクロツールバーの「X軸を戻す」ボタンをクリックすると, 表示領域の位置が初期状態に戻ります。

4.4.3h スペクトル表示設定

1. マスクロツールバーの「モード」ボタンをクリックし,「スペクトル位置設定」を選択する。

プルダウンリストが表示されます。

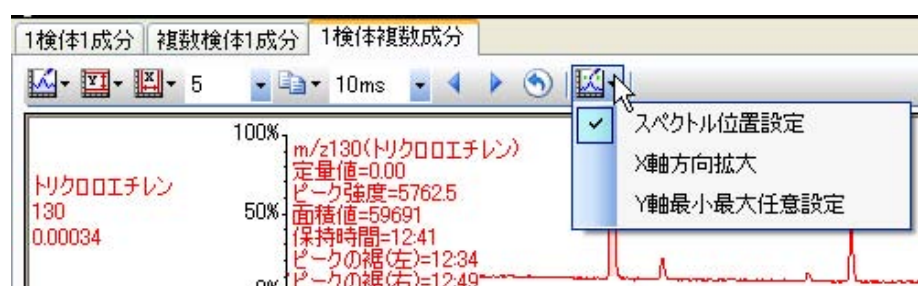


図4.79

グラフ内でマウスカーソルは上矢印に変化します。

2. マウスの左ボタンでスペクトル表示位置を, マウスの右ボタンで差し引く/バックグラウンドを指定する。

マウスの左ボタンでグラフ上をクリックするとその位置に青線が引かれます。マウスの右ボタンでグラフ上をクリックするとその位置に緑線が引かれます, 緑線は青線の左右に1本ずつ指定できます。青線の位置のスペクトルが「未知スペクトル」に表示されます。

4.4.3i クリップボードへコピー

1. マスクロツツールバーの「クリップボードへコピー」ボタンをクリックする。
プルダウンリストが表示されます。

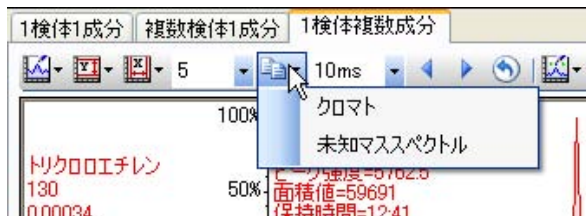


図 4.80

2. コピーしたいグラフを選択する。
選択したグラフがクリップボードへコピーされます。

4.5 オプション設定

各パネルでの表示オプションを設定します。

4.5.1 基本設定

各パネル共通の表示オプションを設定します。

1. メニューの[ツール(T)]-[オプション(O)]をクリックする。
オプション設定画面が表示されます。
2. 「基本設定」タブをクリックする。



図 4.81

目次

3. 各種パラメータを変更して[OK]ボタンをクリックする。

以下のパラメータを設定できます。

- R.T.時間単位： 化合物一覧, 定量結果一覧, 保持時間補正のテーブルに表示される保持時間の単位を, 時分秒, 分, 秒, より選択します。
- 定量値単位： 化合物一覧, 定量結果一覧に表示される定量値の単位を, mg/L, μ g/L, ng/L, ppm, ppb, ppt, %, より選択します。
- 実数値表示方法： 化合物一覧, 定量結果一覧に表示される定量値, グループ定量値, 面積, 基準値, グループ基準値, 定量下限値, 検出下限値, 平均値, 標準偏差, 変動係数の表示方法を, 実数, 指数, より選択します。
- 実数値小数点以下桁数： 化合物一覧, 定量結果一覧に表示される定量値, グループ定量値, 面積, 基準値, グループ基準値, 定量下限値, 検出下限値, 平均値, 標準偏差, 変動係数の小数点以下桁数を設定します。
- 定量値表示色： 定量値が基準値に対して, どの程度近いかを表す表示色を設定します。下記の5段階を設定します。
基準値を越える, 基準値以下, 基準値の1/X以下, 基準値の1/Y以下, 基準値の1/Z以下。
なおX, Y, Zは定量条件ファイルに設定されています。

4.5.2 化合物一覧

化合物一覧パネルの定量結果リストに表示する列項目を選択します。

1. メニューの[ツール(T)]-[オプション(O)]をクリックする。
オプション設定画面が表示されます。
2. 「化合物一覧」タブをクリックする。



図4.82

3. 化合物一覧パネルで表示する項目のチェックを付け, [OK]ボタンをクリックする。
定量結果リストには, 上記でチェックした項目(列)のみ表示されます。

4.5.3 試料一覧

試料一覧パネルの試料条件リストに表示する列項目を選択します。

1. メニューの[ツール(T)]-[オプション(O)]をクリックする。
オプション設定画面が表示されます。
2. 「試料一覧」タブをクリックする。

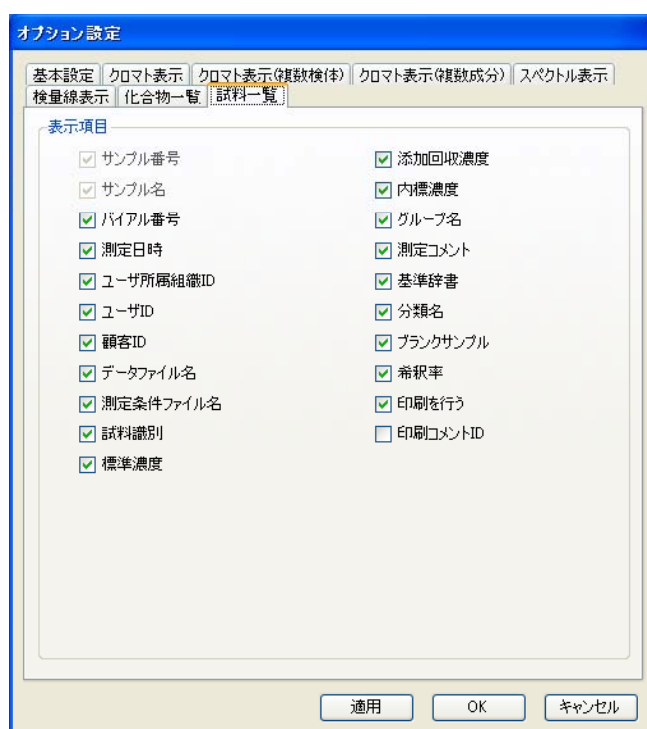


図4.83

3. 試料一覧パネルで表示する項目のチェックを付け, 「OK」ボタンをクリックする。
試料条件リストには, 上記でチェックした項目(列)のみ表示されます。

4.5.4 検量線表示

検量線パネルの検量線描画パラメータを設定します。

1. メニューの[ツール(T)]-[オプション(O)]をクリックする。
オプション設定画面が表示されます。
2. 「検量線」タブをクリックする。

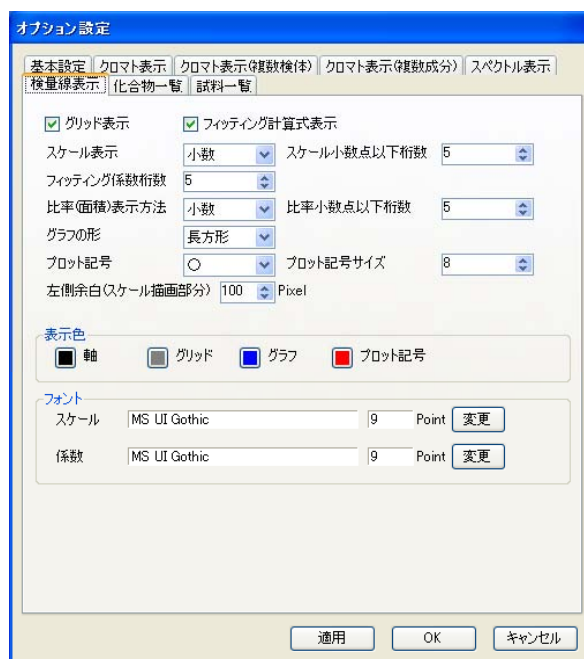


図 4.84

3. 各種パラメータを変更して[OK]ボタンをクリックする。

以下のパラメータを設定できます。

グリッド表示： グラフにグリッドを表示するか否かを設定します。

フィッティング計算式表示：

グラフにフィッティング計算式を表示するか否かを設定します。

スケール表示：

スケールを小数表示にするか、指数表示にするか選択します。

小数点以下桁数： スケール表示の小数点以下桁数を設定します。

フィッティング係数桁数： フィッティング係数の桁数を設定します。

比率(面積)表示方式： 比率(面積)を小数表示にするか、指数表示にするか選択します。

小数点以下桁数： 比率(面積)表示の小数点以下桁数を設定します。

グラフの形： グラフの形を長方形と正方形から選択します。

プロットの形： プロット点に表示する記号を○, □, △から選択します。

プロット記号サイズ： プロット記号のサイズをポイントで設定します。

左側余白： グラフの左側余白をピクセル単位で設定します。

表示色：

軸： XY軸の表示色を設定します。

グリッド： グリッドの表示色を設定します。

グラフ： 検量線グラフの表示色を設定します。

プロット記号： データ点のプロット記号の表示色を設定します。

フォント：

スケール： スケール文字列のフォント名および大きさを設定します。

係数： 検量線式や相関係数の文字列のフォント名および大きさを設定します。

4.5.5 クロマトグラム表示

グラフ表示エリアで、「1検体1成分」タブをクリックしたときに表示されるクロマトグラム、データ表示エリアの試料一覧タブをクリックしたときに表示されるTIC、データ表示エリアの保持時間予測タブをクリックしたときに表示されるTIC、の描画パラメータを設定します。

1. メニューの[ツール(T)]-[オプション(O)]をクリックする。
オプション設定画面が表示されます。
2. 「クロマト表示」タブをクリックする。



図4.85

3. 各種パラメータを変更して[OK]ボタンをクリックする。

以下のパラメータを設定できます。

- 詳細表示： 定量イオンおよび参照イオンのマスクロマトグラムに詳細情報を表示するかどうかを設定します。定量イオンのマスクロマトグラムに表示する詳細情報は、定量値、ピーク強度、面積値、保持時間、ピーク左右の裾、S/N比です。参照イオンのマスクロマトグラムに表示する詳細情報は、面積値、I/Q比、です。
- クロマトX軸スケール： クロマトグラムの時間軸の単位を設定します。時分秒、分、スキャン、から選択します。
- クロマトY軸スケール： クロマトグラムの強度軸の単位を設定します。強度、%から選択します。
- クロマトラベル方向： クロマトラベルの表示方向を、縦、横、から選択します。ラベルは、試料一覧のTICおよび保持時間予測のTIC、のみ表示します。

上側余白 (ラベル描画部分) : ラベル描画部分のグラフ上側余白の大きさをピクセル単位で設定します。

表示色:

- 軸: クロマトグラムの軸描画色を選択します。
- ラベル: クロマトグラムのラベル表示色を選択します。
- TIC: TICを表示するときの表示色を選択します。
- S/N: S/Nを表示するときの表示色を選択します。(システム適合性化合物のみ)
- テーリング: テーリングを表示するときの表示色を選択します。(システム適合性化合物のみ)
- 理論段数: 理論段数を表示するときの表示色を選択します。(システム適合性化合物のみ)
- 分離度: 分離度を表示するときの表示色を選択します。(システム適合性化合物のみ)

フォント:

- スケール: クロマトグラムのスケールの表示フォントを設定します。
- ラベル: クロマトグラムのラベルの表示フォントを設定します。
- 詳細表示: クロマトグラム上に表示する詳細表示の表示フォントを設定します。

クロマト表示範囲リセット: 1検体1成分のクロマトグラムの表示時間範囲を, ピーク検出幅 (定量条件設定値), 固定値, から選択します。固定値を選択したときは, 表示時間 (秒数) を設定します。選択, 設定後, 「リセット」ボタンをクリックすることにより, 変更が確定しクロマトグラム表示に適用されます。

4.5.6 クロマトグラム表示 (複数検体)

グラフ表示エリアで, 「複数検体1成分」タブをクリックしたときに表示されるクロマトグラムの描画パラメータを設定します。

1. メニューの [ツール(T)] - [オプション(O)] をクリックする。
オプション設定画面が表示されます。
2. 「クロマト表示 (複数検体)」タブをクリックする。



図 4.86

3. 各種パラメータを変更して[OK]ボタンをクリックする。

以下のパラメータを設定できます。

- ファイル名表示： マスクロマトグラムにファイル名を表示するか否かを設定します。
- 詳細表示： マスクロマトグラムに詳細情報を表示するか否かを設定します。詳細情報は定量値, ピーク強度, 面積値, 保持時間, ピーク左右の裾, S/N比, です。
- スケールラベル表示： マスクロマトグラムにスケールラベルを表示するか否かを設定します。スケールラベルはY軸スケール左側に表示するラベルで, ファイル名, 試料種類, 定量値, を表示します。
- クロマトX軸スケール： クロマトグラムの時間軸の単位を設定します。時分秒, 分, スキャン, から選択します。
- クロマトY軸スケール： クロマトグラムの強度軸の単位を設定します。強度, %, から選択します。
- クロマト表示範囲： クロマトグラムの表示時間範囲を, ピーク検出幅 (定量条件設定値), 固定値, から選択します。固定値を選択したときは, 表示時間 (秒数)を設定します。
- 左側余白 (スケール描画部分)： スケールラベルを描画する, Y軸スケール左側余白をピクセル単位で設定します。
- 表示色：
- 軸： クロマトグラムの軸描画色を選択します。
 - グラフ1： 1番目のグラフ, 6番目のグラフ, ...の表示色を選択します。
 - グラフ2： 2番目のグラフ, 7番目のグラフ, ...の表示色を選択します。

グラフ3:	3番目のグラフ, 8番目のグラフ, ...の表示色を選択します。
グラフ4:	4番目のグラフ, 9番目のグラフ, ...の表示色を選択します。
グラフ5:	5番目のグラフ, 10番目のグラフ, ...の表示色を選択します。
フォント:	
スケール:	クロマトグラムのスケールの表示フォントを設定します。
ラベル:	クロマトグラムのラベルの表示フォントを設定します。
詳細表示:	クロマトグラムの詳細表示の表示フォントを設定します。
スケールラベル:	クロマトグラムのスケールラベルの表示フォントを設定します。

4.5.7 クロマトグラム表示(複数成分)

グラフ表示エリアで, 「1検体複数成分」タブをクリックしたときに表示されるクロマトグラムの描画パラメータを設定します。

1. メニューの[ツール(T)]-[オプション(O)]をクリックする。
オプション設定画面が表示されます。
2. 「クロマト表示(複数成分)」タブをクリックする。

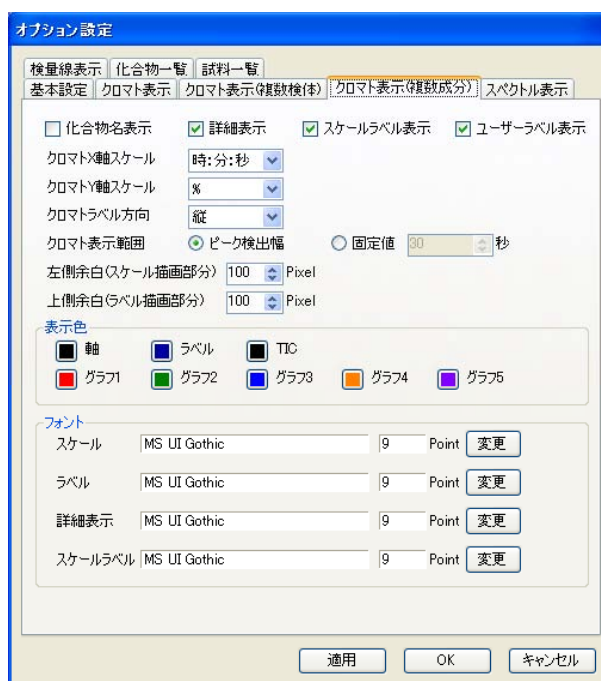


図 4.87

3. 各種パラメータを変更して[OK]ボタンをクリックする。

以下のパラメータを設定できます。

化合物名表示: スクロマトグラムに化合物名を表示するか否かを設定します。

詳細表示: マスクロマトグラムに詳細情報を表示するか否かを設定します。詳細情報は定量値, ピーク強度, 面積値, 保持時間, ピーク左右の裾, S/N比, です。

スケールラベル表示: マスクロマトグラムにスケールラベルを表示するか否かを設定します。スケールラベルはY軸スケール左側に表示するラベルで, 化合物名, 定量イオン, 定量値, を表示します。

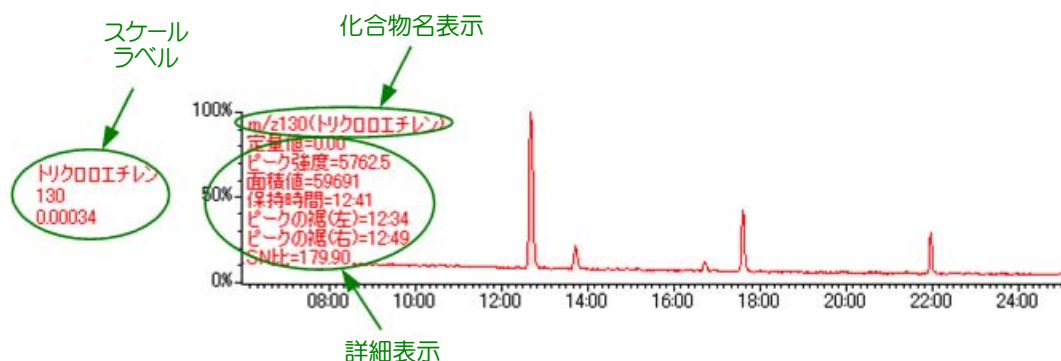


図4.88

ユーザラベル表示: クロマトグラムにユーザラベルを表示するか否かを設定します。ユーザラベルはグラフ上部に表示するラベルで, 化合物名を表示します。クロマト表示方法が「グラフを並べる(Y軸共通)」を選択したときのみ表示します。

クロマトX軸スケール: クロマトグラムの時間軸の単位を設定します。時分秒, 分, スキャン, から選択します。

クロマトY軸スケール: クロマトグラムの強度軸の単位を設定します。強度, %から選択します。

クロマトラベル方向: ユーザラベルの表示方向を, 縦, 横, から選択します。

クロマト表示範囲: クロマトグラムの表示時間範囲を, ピーク検出幅(定量条件設定値), 固定値, から選択します。固定値を選択したときは, 表示時間(秒数)を設定します。

上側余白(ラベル描画部分): ユーザラベル描画部分のグラフ上側余白の大きさをピクセル単位で設定します。

左側余白(スケール描画部分): スケールラベル描画部分のグラフ左側余白の大きさをピクセル単位で設定します。

表示色:

軸: クロマトグラムの軸描画色を選択します。

ラベル: クロマトグラムのユーザラベル表示色を選択します。

TIC: TICを表示するときの表示色を選択します。

グラフ1: 1番目のグラフ, 6番目のグラフ, ...の表示色を選択します。

目次

グラフ2:	2番目のグラフ, 7番目のグラフ, ...の表示色を選択します。
グラフ3:	3番目のグラフ, 8番目のグラフ, ...の表示色を選択します。
グラフ4:	4番目のグラフ, 9番目のグラフ, ...の表示色を選択します。
グラフ5:	5番目のグラフ, 10番目のグラフ, ...の表示色を選択します。
フォント:	
スケール:	クロマトグラムのスケールの表示フォントを設定します。
ラベル:	クロマトグラムのラベルの表示フォントを設定します。
詳細表示:	クロマトグラムの詳細表示の表示フォントを設定します。
スケールラベル:	クロマトグラムのスケールラベルの表示フォントを設定します。

4.5.8 スペクトル表示

グラフ表示エリアで, 「1検体1成分」「1検体複数成分」タブをクリックしたときに表示されるスペクトルの描画パラメータを設定します。

1. メニューの[ツール(T)]-オプション(O)]をクリックする。
オプション設定画面が表示されます。
2. 「スペクトル表示」タブをクリックする。

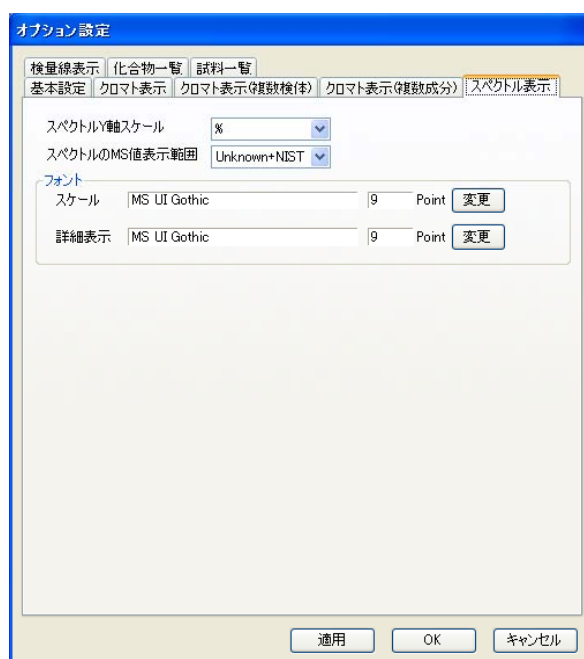


図4.89

3. 各種パラメータを変更して[OK]ボタンをクリックする。

以下のパラメータを設定できます。

スペクトルY軸スケール:	スペクトルの強度軸の単位を設定します。強度, %, から選択します。
スペクトルのMS表示範囲:	スペクトルを表示するMS範囲を, Unknown, Unknown+NISTから選択します。
Unknown:	[未知スペクトル]のMS範囲が表示範囲になります。

Unknown+NIST:	[未知スペクトル]と[参照スペクトル]を合わせた最小から最大までのMS範囲が表示範囲になります。
フォント:	
スケール:	スペクトルのスケールの表示フォントを設定します。
詳細表示:	スペクトルの詳細表示の表示フォントを設定します。

4.6 その他の機能

4.6.1 保存

4.6.1a 上書き保存

- ◆ メニューの[ファイル(F)]-[上書き保存(S)]をクリックする。
まず上書き確認を行います。確認後、もし定量条件等が変更されていて、再計算がされていない場合は、再計算を行った後上書き保存を行います。

4.6.1b 名前を付けて保存

定量条件ファイルを名前を変えて保存することができます。

1. メニューの[ファイル(F)]-[名前を付けて保存(A)]をクリックする。
ファイル選択ダイアログ画面が表示されます。
 2. 保存フォルダを選択し、ファイル名を入力したのち[保存]ボタンをクリックする。
もし定量条件等が変更されていて、再計算がされていない場合は、再計算を行います。
定量条件ファイルを保存するフォルダにより動作に違いがあります。
- a. 同じフォルダに名前を変えて保存する場合。
- 設定されている条件で、入力された名前の定量条件ファイルを作成し、定量結果ファイルと検量線ファイルは、新規に作成した定量フォルダ内に保存されます。



図4.90

3. 違うフォルダに保存する場合。

設定されている条件で、選択されたフォルダに入力された名前の定量条件ファイルを作成し、定量結果ファイルと検量線ファイルは、新規に作成した定量フォルダ内に保存されます。また選択されたフォルダに測定結果ファイルをコピーします。

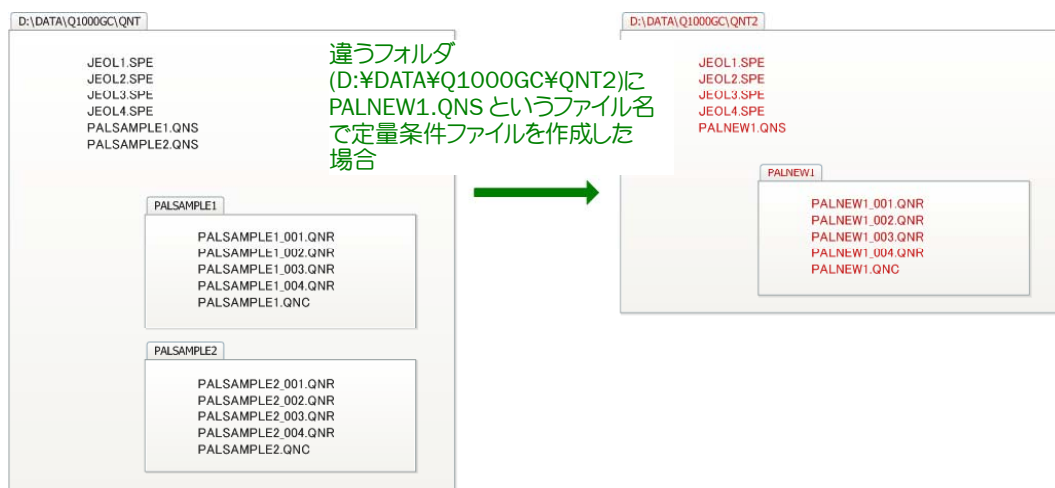


図 4.91

4.6.1c 保持時間更新ファイルの作成

定量条件ファイルに、保持時間補正試料 (n-アルカン) または標準試料が含まれている場合は、保持時間を更新した定量条件ファイルを作成することができます。

1. メニューの[ファイル(F)]-[保持時間更新ファイルの作成(R)]をクリックする。

ファイル選択ダイアログ画面が表示されます。

2. 保存フォルダを選択し、ファイル名を入力したのち[保存]ボタンをクリックする。

もし定量条件等が変更されていて、再計算がされていない場合は下記の画面が表示されます。

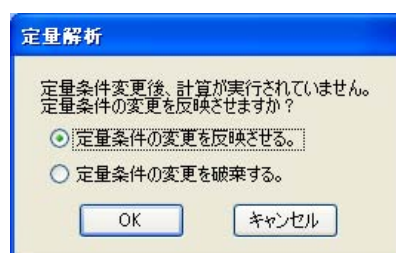


図 4.92

この画面で次の3通りの動作が可能です。

a. 「定量条件の変更を反映させる。」を選択して[OK]ボタンをクリックする。

現在設定されている定量条件で再計算後、保持時間が更新された定量条件ファイルを作成します。

b. 「定量条件の変更を破棄する。」を選択して[OK]ボタンをクリックする。

定量条件の変更を破棄して、保持時間が更新された定量条件ファイルを作成します。

c. 「キャンセル」ボタンをクリックする。

保持時間更新ファイルの作成をキャンセルします。

✕ 保持時間の更新は、保持時間補正試料 (n-アルカン) を使用する場合と、標準試料を使用する場合とでは方法が違います。

- 保持時間補正試料を使用する場合：保持時間補正試料を用いて計算した保持時間補正值を、保持時間設定値として、定量条件ファイルに書き込みます。
- 標準試料を使用する場合：標準試料の中でいちばん濃度の高い試料の保持時間を、保持時間設定値として、定量条件ファイルに書き込みます。

4.6.2 印刷

4.6.2a 印刷

◆ メニューの[ファイル(F)]-[印刷(P)]をクリックする。

もし定量条件等が変更されていて、再計算がされていない場合は下記の画面が表示されます。

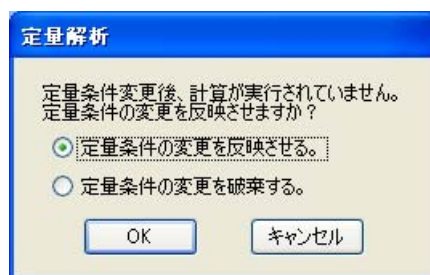


図4.93

この画面で次の3通りの動作が可能です。

a. 「定量条件の変更を反映させる。」を選択して[OK]ボタンをクリックする。

現在設定されている定量条件で再計算後、設定されている印刷テンプレートを用い、設定されているプリンターへ出力します。

b. 「定量条件の変更を破棄する。」を選択して[OK]ボタンをクリックする。

定量条件の変更を破棄して、設定されている印刷テンプレートを用い、設定されているプリンターへ出力します。

c. 「キャンセル」ボタンをクリックする。

印刷はキャンセルされます。

4.6.2b フォーマットを指定して印刷

1. メニューの[ファイル(F)]-[フォーマットを指定して印刷(F)]をクリックする。

もし定量条件等が変更されていて、再計算がされていない場合は下記の画面が表示されます。

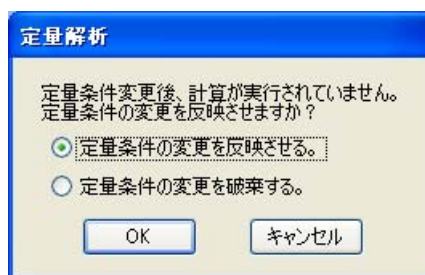


図 4.94

この画面で次の3通りの動作が可能です。

- a. 「定量条件の変更を反映させる。」を選択して[OK]ボタンをクリックする。
現在設定されている定量条件で再計算後、フォーマットを指定して印刷画面が表示されます。
- b. 「定量条件の変更を破棄する。」を選択して[OK]ボタンをクリックする。
定量条件の変更を破棄して、フォーマットを指定して印刷画面が表示されます。
- c. [キャンセル]ボタンをクリックする。
フォーマットを指定して印刷はキャンセルされます。

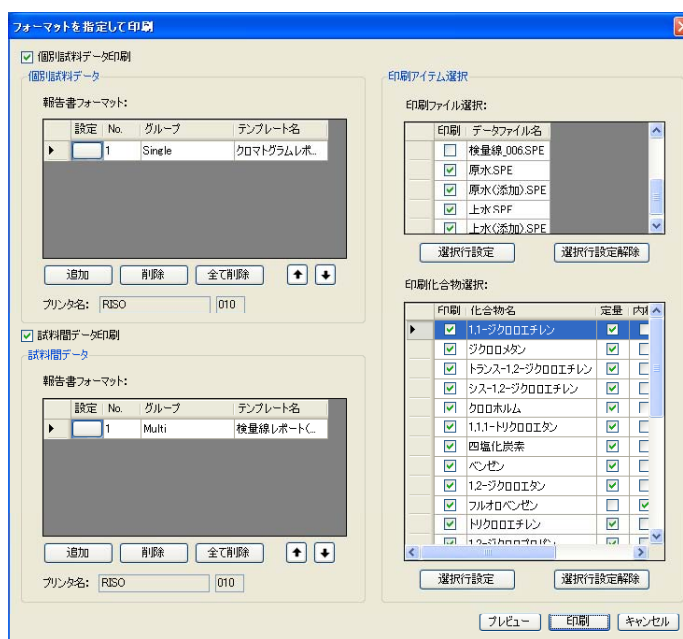


図 4.95

2. 各種印刷パラメータを設定する。

次の4種類のパラメータを設定します。

a. 個別試料データの印刷フォーマット

試料毎の印刷を行う場合の印刷条件を設定します。複数の印刷テンプレートを登録できます。登録方法は以下です。

- 「個別試料データ印刷」チェックを付けます。
- 「追加」ボタンをクリックします。行が1行追加されます。
- 追加された行の「設定」ボタンをクリックします。印刷設定画面が表示されます。

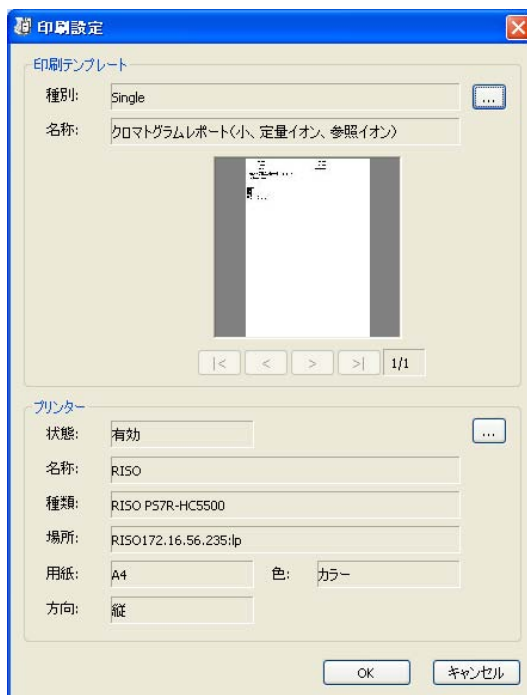


図 4.96

- 印刷設定画面の「印刷テンプレート」の「種別」右の「...」ボタンをクリックします。報告書テンプレート選択画面が表示されます。

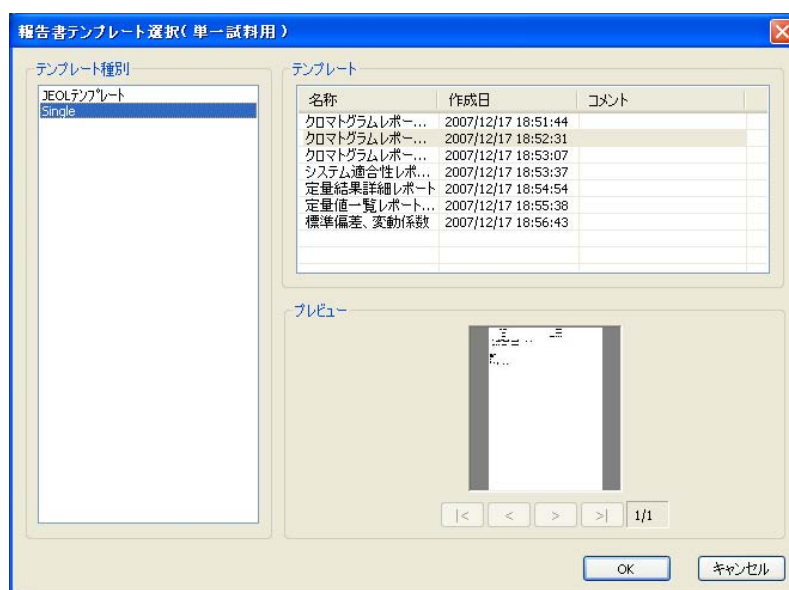


図 4.97

- テンプレート種別を選択して、テンプレートを選択し、「OK」ボタンをクリックします。
- 印刷設定画面の「プリンター」の「状態」右の「...」ボタンをクリックします。プリンターの選択画面が表示されます。

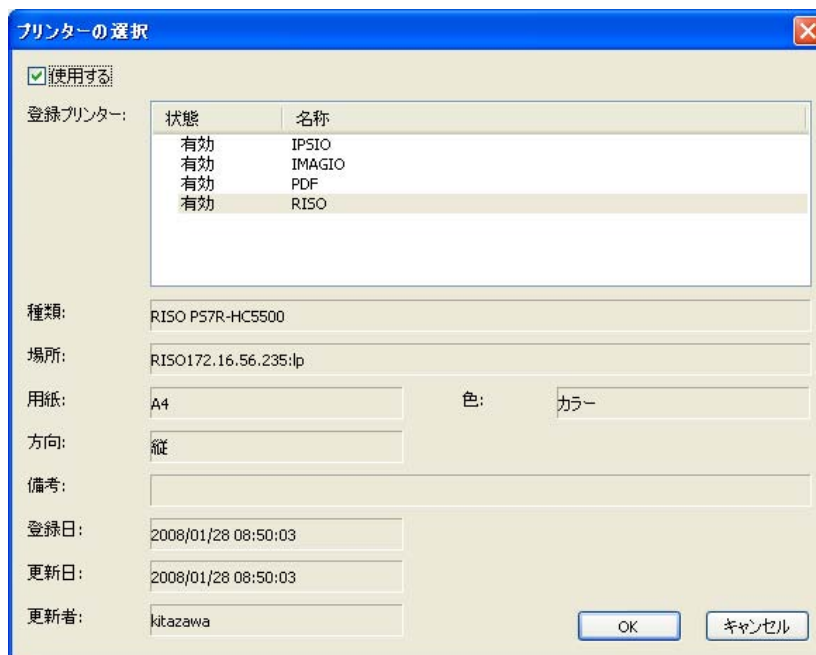


図4.98

- プリント選択画面の「使用する」チェックを付けて、「登録プリンター」から使用するプリンターを選択して、[OK]ボタンをクリックします。

印刷テンプレートの登録解除は、登録解除行をマウスで選択後、「削除」ボタンをクリックします。

b. 試料間データの印刷フォーマット

複数試料共通または複数試料にまたがる結果の印刷を行う場合の印刷条件を設定します。複数の印刷テンプレートを登録できます。登録方法は以下です。

- 「試料間データ印刷」チェックを付けます。
- 以降、「個別試料データの印刷フォーマット」を参照ください。

c. 印刷ファイル選択

印刷を行うファイルにチェックを付けます。

d. 印刷化合物選択

印刷を行う化合物にチェックを付けます。

3. [プレビュー]ボタンまたは[印刷]ボタンをクリックする。

プレビューまたは印刷準備中は下記のダイアログ画面が表示されます。

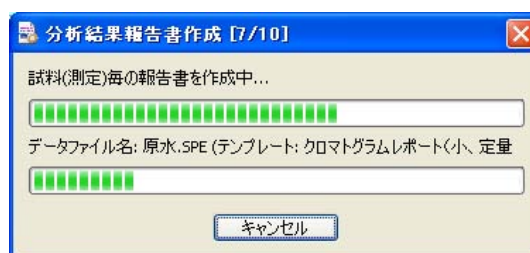


図4.99

[プレビュー]ボタンをクリックした場合、プレビュー画面に印刷プレビューが表示されます。プレビュー画面は「個別試料データ」、「試料間データ」別に表示されます。また「個別試料データ」はファイルごとに、子画面を作成します。

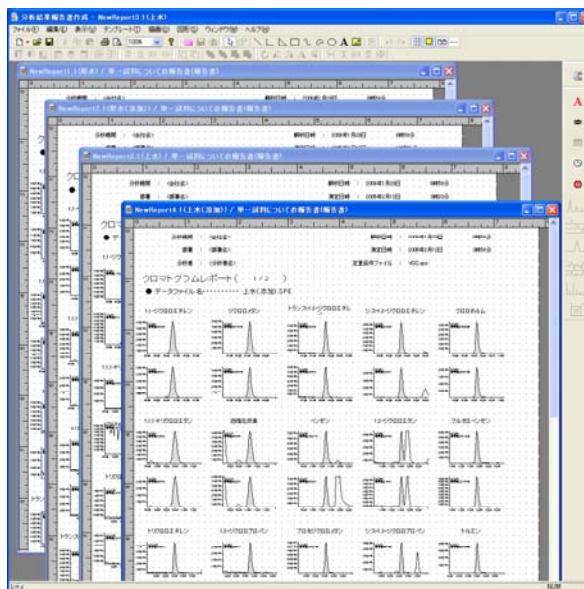


図4.100

「印刷」ボタンをクリックした場合は、設定したプリンタに印刷されます。

4. プレビュー画面で印刷したい子画面を選択して、[ファイル(F)]-[印刷(P)]をクリックする。

プリンタ選択ダイアログでプリンタを選択したのち印刷されます。

子画面が複数ある場合は、[ファイル(F)]-[すべて印刷(L)]により、すべてのプレビューを印刷できます。

4.6.2c 印刷設定(化合物毎)

印刷する化合物の設定を行います。

1. メニューの[ファイル(F)]-[印刷設定(化合物毎)(C)]をクリックする。

印刷設定(化合物毎)画面が表示されます。



図4.101

2. 印刷する化合物のチェックを付ける。印刷しない化合物のチェックは外す。
設定後, [OK] ボタンをクリックします。
~~✗~~ これらの設定は, 「フォーマットを指定して印刷」時にも行えます。

4.6.3 コピー

データ表示エリアの各タブで表示される表を, クリップボードにコピーすることができます。

1. コピーする表のデータを, マウスで選択状態にする。
コピーできる表データは, 化合物一覧タブの「定量結果リスト」, 試料一覧タブの「試料条件リスト」, 定量結果一覧タブの「化合物一覧表」および「グループ一覧表」, 検量線タブの「検量線データ」, 保持時間予測タブの「保持時間表示」です。
2. メニューの[編集(E)]-[コピー(C)]をクリックする。
選択したデータが列ヘッダーとともに, TAB区切りでクリップボードへコピーされます。

4.6.4 検索

化合物一覧タブおよび定量結果一覧タブにおいて, 化合物名を検索できます。

1. 化合物一覧タブまたは定量結果一覧タブを選択して, メニューの[編集(E)]-[検索(S)]をクリックする。
検索画面が表示されます。

図4.102

2. 検索する文字列を入力して[OK]ボタンをクリックする。
検索文字列が見つかった場合は, 見つかった化合物が選択状態になります。

4.6.5 化合物スライドショー

現在選択されているファイル(試料)の化合物のクロマトグラムを、登録してある順番に表示します。

1. 「グラフ表示エリア」の「1検体1成分」または「1検体複数成分」タブをクリックする。
2. メニューの[ツール(T)]-[化合物スライドショー(C)]をクリックする。
化合物スライドショー画面が表示されます。

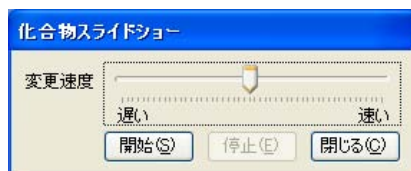


図4.103

3. 変更速度を調整する。
「変更速度」スライダーで化合物の切り替え時間を調整します。切り替え時間はCPUの性能に依存します。
4. 開始ボタンをクリックする。
表示する化合物が指定時間で切り替わります。
5. 途中停止させるときは[停止]ボタンをクリックする。
化合物の切り替わりは停止します。

4.6.6 プログラムの終了

- ◆ メニューの[ファイル(F)]-[終了(X)]をクリックするか、定量プログラムメイン画面右上の[X]ボタンをクリックする。
もし定量条件等が変更されていて、再計算がされていない場合は下記の画面が表示されます。

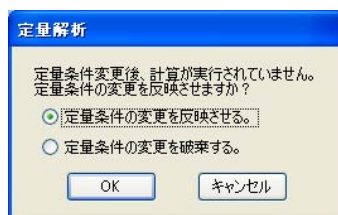


図4.104

この画面で次の3通りの動作が可能です。

- a. 「定量条件の変更を反映させる。」を選択して[OK]ボタンをクリックする。
現在設定されている定量条件で再計算後、定量プログラムを終了します。
- b. 「定量条件の変更を破棄する。」を選択して[OK]ボタンをクリックする。
定量条件の変更を破棄して、定量プログラムを終了します。
- c. [キャンセル]ボタンをクリックする。
終了はキャンセルされます。

5

分析結果報告書

5.1	マスターデータの登録	5-1
5.2	テンプレートの登録	5-2

5.1 マスターデータの登録

1. Q1000GCメインプログラム画面の「Q1000GCアプリケーション」アイコングループ内、「分析結果報告書」アイコン(図5.1)をダブルクリックする。



図5.1

分析結果報告書作成画面が表示されます。



図 5.2

2. 「マスターデータの編集」をクリックする。

QmsProperty画面が表示されます。

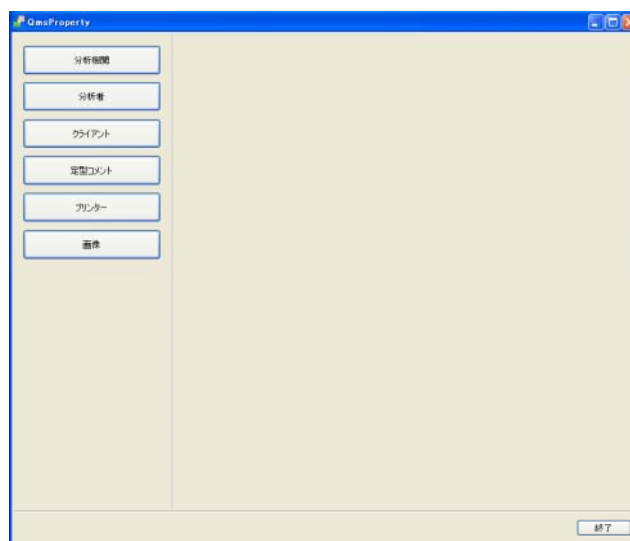


図5.3

3. 登録または編集したいパラメータのボタンをクリックする。

各パラメータに対応した登録・編集画面が表示されます。

設定方法は「分析結果報告書作成プログラム」の取扱説明書を参照ください。

5.2 テンプレートの登録

1. Q1000GCメインプログラム画面の「Q1000GCアプリケーション」アイコングループ内、「分析結果報告書」アイコン(図5.1)をダブルクリックする。

分析結果報告書作成画面が表示されます。

2. 「印刷テンプレートの作成」をクリックする。

「報告書テンプレート」ダイアログ画面が表示されます。

設定方法は「分析結果報告書作成プログラム」の取扱説明書を参照ください。

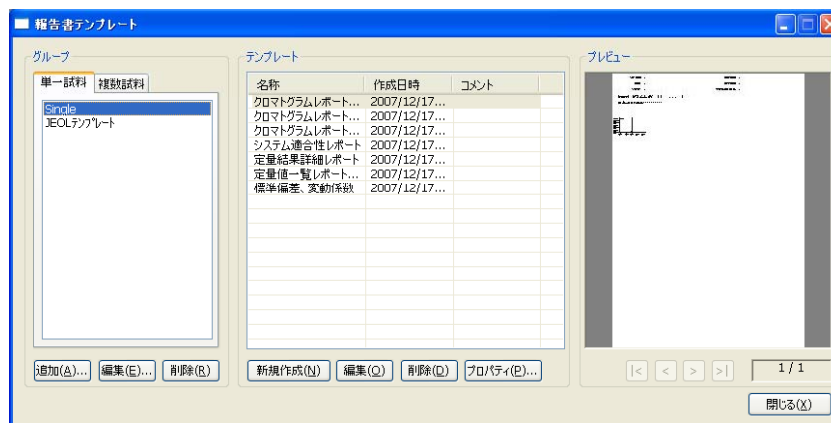


図5.4



その他のプログラム

多成分定量処理プログラムをインストールしますと, JMS-Q1000GCシリーズMSコントロールソフトウェアの一部のプログラムの機能が変更されます。以下に変更されるプログラムの機能を説明します。

6.1	メインプログラム.....	6-1
6.1.1	メインプログラムの起動.....	6-1
6.1.2	Q1000GC各プログラムの起動.....	6-2
6.1.3	起動アイコンの編集.....	6-2
6.1.3a	起動アイコンの登録.....	6-2
6.1.3b	起動アイコンの削除.....	6-3
6.1.3c	起動アイコンの名称の変更.....	6-3
6.1.4	環境設定.....	6-3
6.1.5	メンテナンスモニタ.....	6-4
6.1.6	装置ステータスの表示.....	6-5
6.1.7	バージョン情報.....	6-5
6.2	ファイルメンテナンス.....	6-6
6.2.1	ファイルメンテナンスプログラムの起動.....	6-6
6.2.2	フォルダの操作.....	6-7
6.2.2a	フォルダの作成.....	6-7
6.2.3	ファイルの操作.....	6-7
6.2.3a	ファイル名の表示.....	6-7
6.2.3b	ファイル表示種別設定.....	6-7
6.2.3c	表示方法の設定.....	6-8
6.2.3d	詳細表示の設定.....	6-9
6.2.4	データファイルのプレビュー.....	6-10
6.2.5	コメントの編集.....	6-11
6.2.6	ファイルの圧縮.....	6-11
6.3	定性解析プログラムの変更点.....	6-12
6.3.1	変更の概要.....	6-12
6.3.2	クロマトのラベリング.....	6-13
6.3.3	ライブラリサーチのオプション設定.....	6-15

6.3.4	ライブラリサーチの化合物名転記	6-15
6.3.5	リバーササーチ	6-16
6.3.6	クロマトのベースラインカット	6-18
6.3.7	マルチスペクトル表示	6-18
6.3.8	スペクトルのベースライン位置設定	6-19
6.3.9	スペクトルのベースラインカット	6-19
6.3.9a	レベルカット	6-19
6.3.9b	ピークカット	6-20
6.3.10	スペクトルページの自動スクロール	6-21
6.3.11	スペクトルのCl,Br含有個数サーチ	6-21
6.3.12	シーケンス印刷設定	6-21
6.3.13	保持時間とI/Q比によるサーチ	6-23
6.4	シーケンス	6-25
6.4.1	シーケンスプログラムの起動	6-25
6.4.2	シーケンスの作成方法	6-26
6.4.3	シーケンステーブルでの編集	6-28
6.4.3a	追加	6-28
6.4.3b	コピー条件設定	6-29
6.4.3c	削除	6-29
6.4.3d	挿入	6-30
6.4.3e	切り取り	6-30
6.4.3f	コピー	6-31
6.4.3g	貼り付け(上書き)	6-31
6.4.3h	貼り付け(挿入)	6-32
6.4.4	シーケンス処理	6-32
6.4.4a	シーケンス開始	6-32
6.4.4b	シーケンス停止	6-33
6.4.4c	測定中止	6-33
6.4.4d	測定終了	6-33
6.4.5	測定	6-33
6.4.6	他のプログラムの起動	6-35
6.4.6a	チューニングプログラムの起動	6-35
6.4.6b	条件設定プログラムの起動	6-35
6.4.6c	定量条件設定プログラムの起動	6-35
6.4.7	その他の機能	6-36
6.4.7a	新規作成	6-36
6.4.7b	シーケンスファイルの読み込み	6-36
6.4.7c	シーケンスファイルの保存	6-36
6.4.7d	印刷	6-37
6.4.7e	履歴の表示	6-37
6.4.7f	整列	6-37
6.5	基準辞書のメンテナンス	6-38
6.5.1	基準辞書の編集	6-39
6.5.1a	基準辞書編集プログラムの起動	6-39
6.5.1b	基準辞書の新規登録	6-39
6.5.1c	基準辞書の削除	6-40
6.5.1d	基準辞書の編集	6-40
6.5.2	基準値データベース作成	6-42

6.5.2a	基準値データベース作成プログラムの起動.....	6-42
6.5.2b	基準値データベースの作成.....	6-42
6.5.2c	基準値データベースのバックアップ	6-43

6.1 メインプログラム

メインプログラムは、Q1000GC関連すべてのソフトウェアを起動することができます。
またメインプログラムには、装置の構成が登録されます。

6.1.1 メインプログラムの起動

以降の説明は、Q1000GCシステムでWindowsXP Professional (以降Windowsと記す)がログオン可能状態となっていることを前提とします。Q1000GCシステムの電源投入方法等については、Q1000GC取扱説明書本体編をご覧ください。

◇注意◇

WindowsXP Professionalの機能である、簡易ユーザ切り替えおよびリモートデスクトップは使用しないでください。

1. Windowsがログオン可能状態のとき、**Ctrl+Alt+Delete**キーを押す。
ログオン画面が表示されます。
2. ユーザ名とパスワードを入力し、OKボタンをクリックする。
ユーザ名とパスワードが正しいと、Windowsが立ち上がります。
 納入直後はユーザ名にadministratorを入力し、パスワードはpasswordを入力します。装置を使用されるユーザ毎に、ユーザ名とパスワードを設定されることをお勧めします。
3. デスクトップ上のGCQMSアイコンをダブルクリックする。

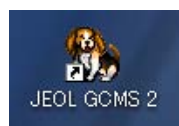


図6.1

メインプログラムが立ち上がります。



図6.2

メインプログラムの起動画面には、Q1000GCで使用するプログラムの起動アイコンが表示されます。起動アイコンは3つのカテゴリーに分けて表示されます。表示カテゴリーは、タブにより変更できます。出荷時は図6.2のように起動アイコンが登録されていますが、起動アイコンの追加や削除は可能です。

6.1.2 Q1000GC各プログラムの起動

メインプログラムの起動画面で、起動するプログラムのアイコンをダブルクリックすると、各アイコンに対応付けられたプログラムが起動します。各プログラムの機能は以下のようになります。

ファイルメンテナンス:	Q1000GCのデータやパラメータファイルのコピーや削除などを行うプログラム
条件設定:	各種測定パラメータファイルを作成するためのプログラム
チューニング:	各部電圧の調整やチューニングを行うためのプログラム
7890コントロール:	ガスクロマトグラムおよびオートインジェクタの制御を行うためのプログラム
シーケンス:	測定とデータ処理をスケジューリングして実行させるプログラム
定性解析:	測定したデータの定性解析を行うプログラム
定量条件設定:	定量解析用パラメータテーブルを作成するためのプログラム
定量解析:	測定したデータの定量解析を行うプログラム

6.1.3 起動アイコンの編集

6.1.3a 起動アイコンの登録

1. 新規起動アイコンを登録するカテゴリーのタブをクリックする。
2. Windowsエクスプローラで、登録するプログラムをマウスの左ボタンでドラッグし、メインプログラムの起動アイコン表示領域にドロップする。

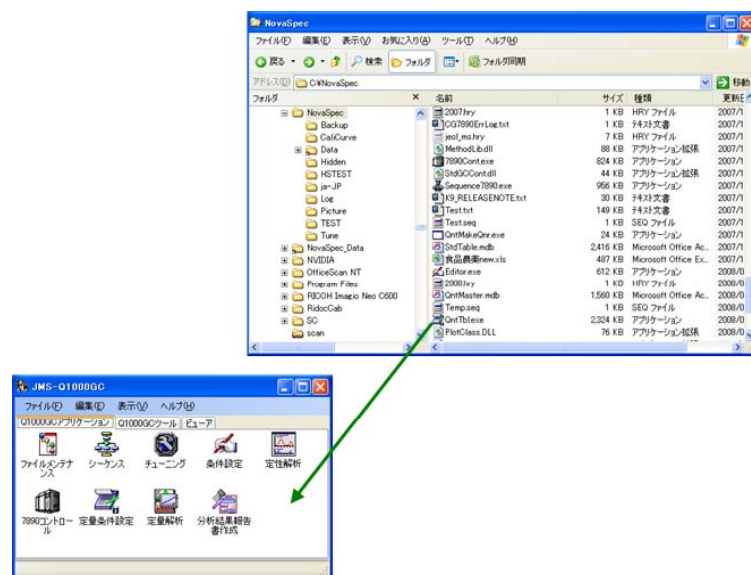


図6.3

メインプログラムに、新しい起動アイコンが、表示されます。

6.1.3b 起動アイコンの削除

1. 削除したい起動アイコンをマウスの左ボタンでクリックする。
クリックした起動アイコンは選択状態になります。
2. メニューの[編集(E)]-[削除(D)]をクリックする。
選択した起動アイコンは、画面から削除されます。

6.1.3c 起動アイコンの名称の変更

1. 名称を変更したい起動アイコンをマウスの左ボタンでクリックする。
クリックした起動アイコンは選択状態になります。
2. 選択した起動アイコンの名称表示位置を、マウスの左ボタンでクリックする。
名称のみ選択状態になります。
3. 起動アイコンの名称をキーボードからの入力に変更する。変更後リターンキーを押す。
名称の変更が確定します。

6.1.4 環境設定

1. メニューの[表示(V)]-[QMS環境設定(E)]をクリックする。
QMS環境設定画面が表示されます。



図6.4

2. 各項目を入力する。

以下の項目を登録します。

質量分析計： 接続する質量分析計の型式を選択します。

ガスクロマトグラフ： 接続するガスクロマトグラフを選択します。

通信ポート： ガスクロマトグラムとの通信を行うCOMポートを選択します。
ガスクロマトグラフで「6890」または「6890N」を選択したと
のみ選択可能です。

ボーレート: ガスクロマトグラムとの通信速度を選択します。

アタッチメント: 利用するアタッチメントを登録します。

3. 設定終了後[OK]ボタンをクリックする。

6.1.5 メンテナンスモニタ

- ◆ メニューの[表示(V)]-[メンテナンスモニタ(M)]をクリックする。
メンテナンスモニタ画面が表示されます。



図 6.5

交換の目安を超えた時間または回数の項目は、赤色の背景で、交換の目安の95%以上100%未満の項目は、黄色の背景で現在の使用状況を表示します。

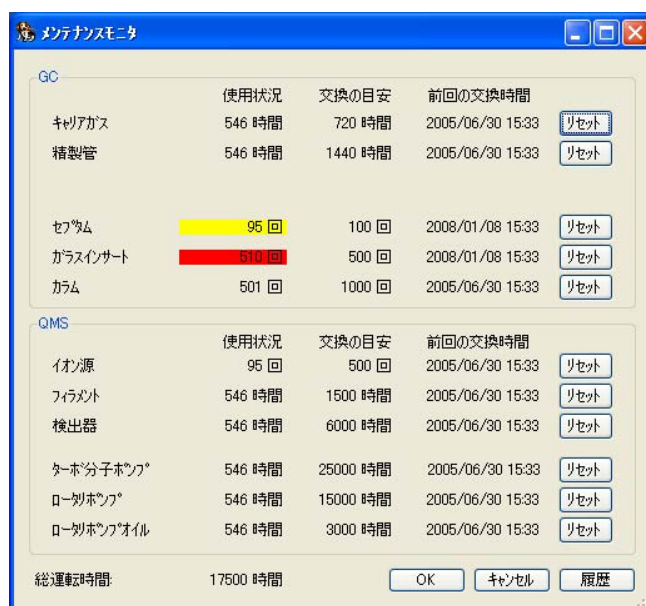


図 6.6

目次

✂ 消耗品の交換やイオン源の洗浄などを行ったときは、本画面を開き該当する項目の「リセット」ボタンをクリックします。画面の使用状況と前回の交換日時、警告の表示がリセットされます。

6.1.6 装置ステータスの表示

- ◆ メニューの[表示(V)]-[装置ステータス表示(S)]にチェックマークが付いていなかったら、クリックする。

メインプログラムの起動画面にステータスバーが表示されます。



図6.7

ステータスバーには、メンテナンスモニタで表示される、交換の目安を超えた時間または回数を使用した項目の詳細が表示されます。

6.1.7 バージョン情報

- ◆ メニューの[ヘルプ(H)]-[バージョン情報(V)]をクリックする。
- 各プログラムのバージョン情報およびリリースノートが表示されます。

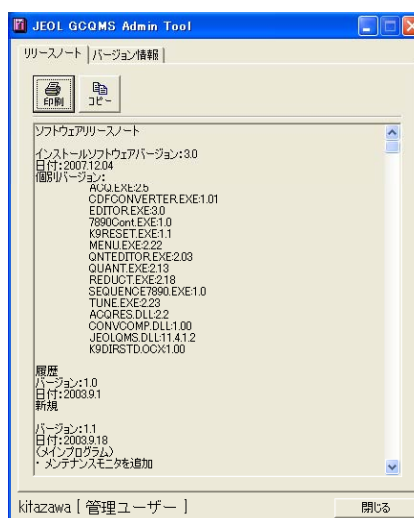


図6.8

6.2 ファイルメンテナンス

ファイルメンテナンスプログラムは、JMS-Q1000GCで作成されるファイルをメンテナンスするプログラムです。またデータファイルに記録されているTICやコメントを表示することができます。

6.2.1 ファイルメンテナンスプログラムの起動

- ◆ Q1000GCメインプログラム画面の「Q1000GCアプリケーション」アイコングループ内、「ファイルメンテナンス」アイコンをダブルクリックする。



図 6.9

ファイルメンテナンスのメイン画面が表示されます。

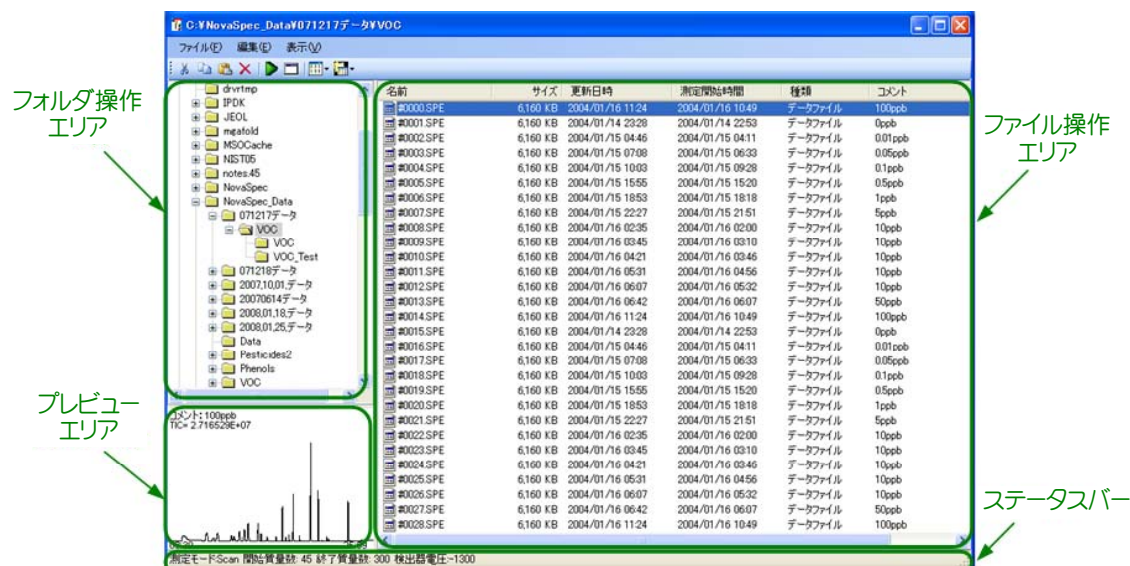


図 6.10

6.2.2 フォルダの操作

6.2.2a フォルダの作成

1. フォルダ操作エリアで、フォルダを作成したい場所をマウスの左ボタンでクリックする。
2. メニューの[ファイル(F)]-[新規作成(N)]-[フォルダ(F)]をクリックする。
フォルダ名設定画面が表示されます。

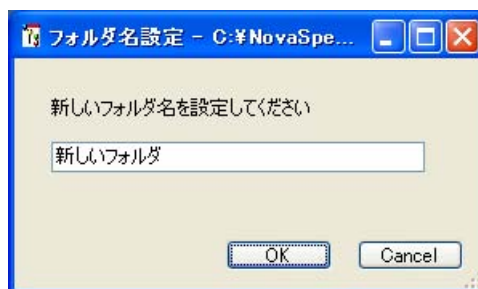


図 6.11

3. フォルダ名を入力して[OK]ボタンをクリックする。
指定したフォルダの下に、新規フォルダが作成されます。

6.2.3 ファイルの操作

6.2.3a ファイル名の表示

- ◆ フォルダ操作エリアで、ファイル一覧を表示したいフォルダを、マウスの左ボタンをクリックすることにより選択する。
ファイル操作エリアに選択したフォルダ内のファイル一覧が表示されます。

6.2.3b ファイル表示種別設定

- ◆ メニューの[表示(V)]-[ファイル表示種別(K)]から表示されるサブメニューからファイル操作エリアに表示するファイル種別を選択する。

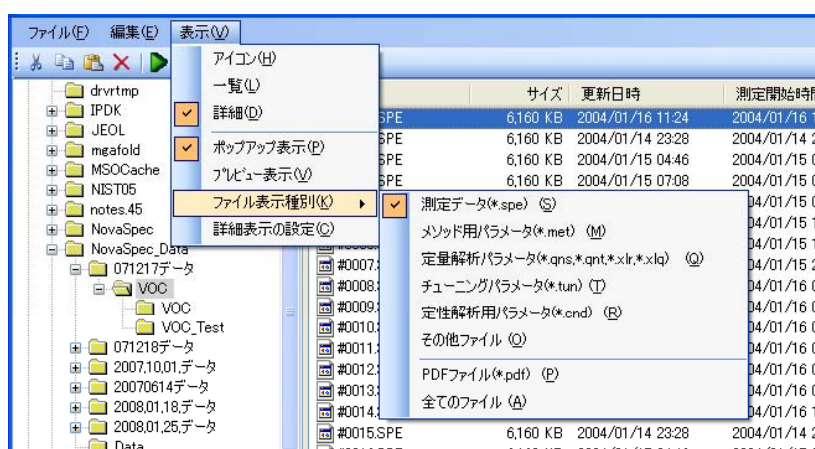


図 6.12

選択できるファイル種別を以下に示します。

ファイル種別	拡張子	備考
測定データ	SPE	MS測定結果データ
メソッド用パラメータ	MET	MS,GC等の測定条件パラメータ
定量解析パラメータ	QNS QNT XLR XLQ	定量条件パラメータ QNSは新形式の定量条件 QNTは旧形式の定量条件
チューニングパラメータ	TUN	
定性解析パラメータ	CND	
その他ファイル	SEQ TXT DOC	SEQ:シーケンスファイル TXT:テキストファイル DOC:Word文書ファイル
PDFファイル	PDF	
すべてのファイル		

6.2.3c 表示方法の設定

- ◆ メニューの[表示(V)]で[アイコン(H)][一覧(L)][詳細(D)]から1つ選択する。

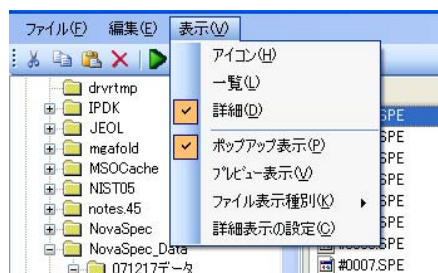


図6.13

以下のように表示が変わります。

- アイコン表示

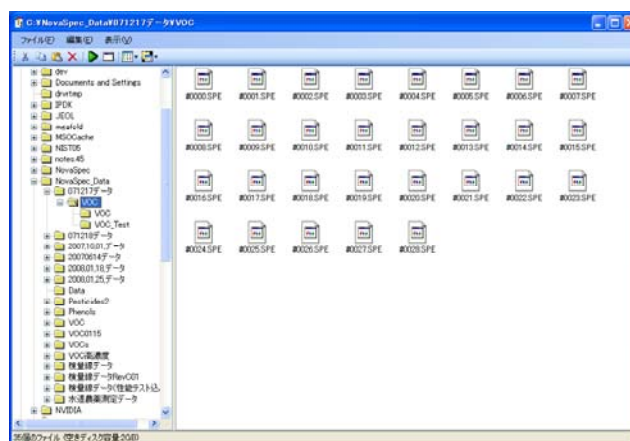


図6.14

目次

● 一覧表示

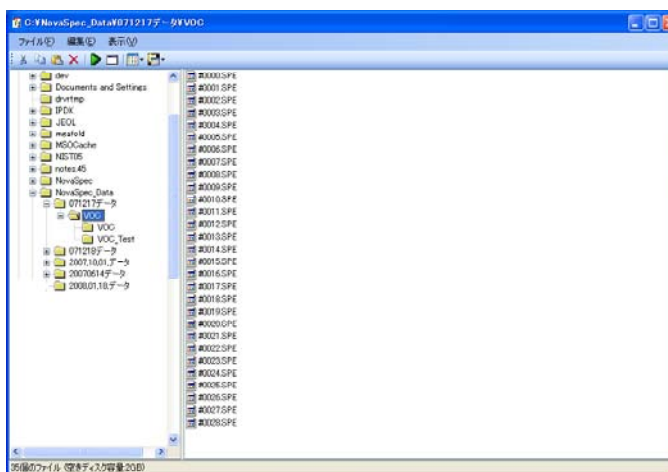


図 6.15

● 詳細表示

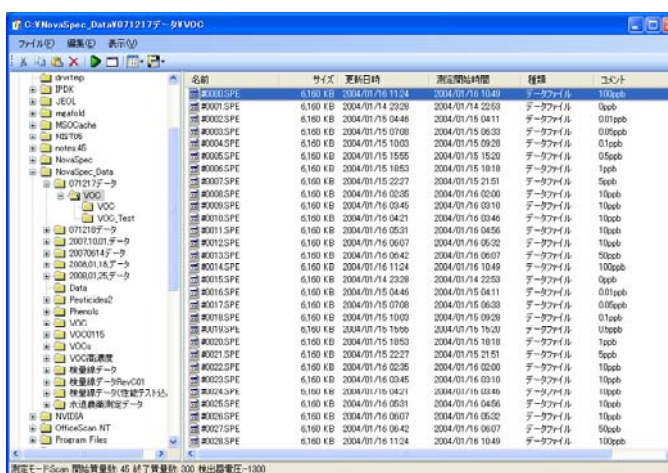


図 6.16

6.2.3d 詳細表示の設定

1. メニューの[表示(V)]-[詳細表示の設定(C)]をクリックする。
詳細表示の設定画面が表示されます。



図 6.17

2. 表示方法の設定で「詳細表示」を選択したときの表示される項目のチェックを付ける。

以下の項目を選択できます。

名前:	ファイル名を表示します。
サイズ:	ファイルのサイズを表示します。
更新日時:	更新日時を表示します。
測定開始日時:	測定データ(拡張子:SPE)のとき測定開始時間を表示します。測定データ以外のファイルのときは空欄になります。
種類:	ファイルの種類を表示します。
コメント:	測定データ(拡張子:SPE)のときコメントを表示します。測定データ以外のファイルのときは空欄になります。

3. [OK]ボタンをクリックする。

ファイル操作エリアに、選択した項目が表示されます。

6.2.4 データファイルのプレビュー

1. メニューの[表示(V)]で[ポップアップ表示(P)]または[プレビュー表示(V)]を選択する。
2. ファイル操作エリアでプレビューを行いたいデータファイルを、マウスの左ボタンでクリックする。

[ポップアップ表示]を選択したときは、データファイルのTICグラフが別画面に表示されます。

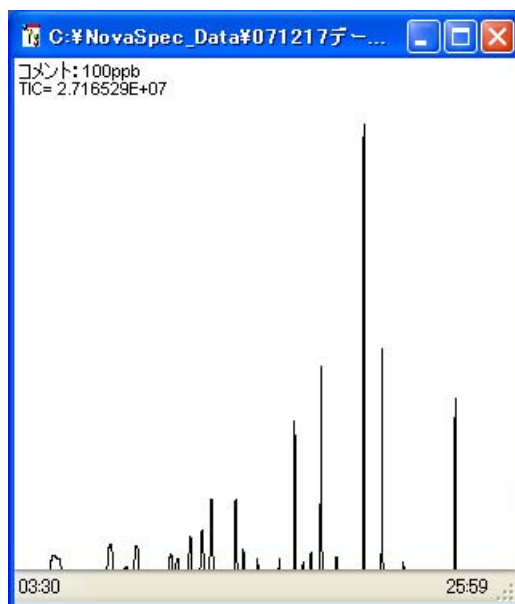


図6.18

[プレビュー表示]を選択したときは、データファイルのTICグラフがプレビューエリアに表示されます。

目次

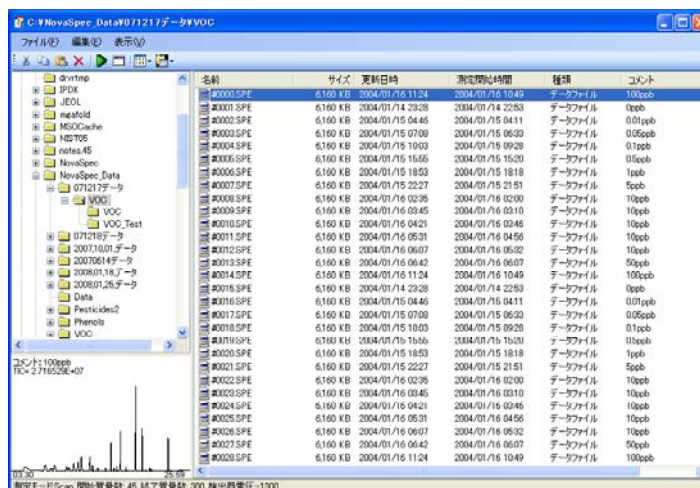


図6.19

6.2.5 コメントの編集

1. コメントを編集したいデータファイルを、ファイル操作エリアで、マウスの左ボタンで選択する。
2. メニューの[編集(E)]-[コメント編集(M)]をクリックする。
コメント編集画面が表示されます。

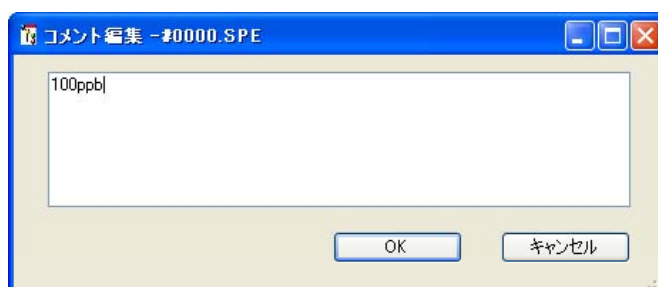


図6.20

3. コメントを編集して[OK]ボタンをクリックする。

6.2.6 ファイルの圧縮

1. ファイル操作エリアで圧縮するファイルを指定します。
複数のファイルを指定できます。
2. メニューの[ファイル(F)]-[送る]-[圧縮 (ZIP)]または[ファイル(F)]-[送る]-[圧縮 (LHA)]をクリックする。
ファイル名入力用のダイアログボックスが表示されます。
3. ファイル名を入力して[保存]ボタンをクリックする。
指定フォーマットの圧縮ファイルが作成されます。

6.3 定性解析プログラムの変更点

多成分定量処理プログラムをインストールすることにより、定性解析プログラムも更新されます。ここでは、定性解析プログラムで新規に追加された部分について説明します。

6.3.1 変更の概要

以下の項目が改良されています。

クロマトのラベリング:	スペクトル情報によるラベリングが可能です。またラベルの縦書きにも対応しました。
ライブラリサーチのオプション設定:	ライブラリサーチ時の類似度閾値設定やスペクトル最小強度等を設定できます。
ライブラリサーチの化合物名転記:	ライブラリサーチを実行するとスペクトルウィンドウに化合物名が転記されます。
リバースサーチ:	設定した化合物に対するリバースサーチを行います。
クロマトのベースラインカット:	表示されているクロマトに対してベースラインカットを行います。
スムージング回数表示:	クロマト表示画面にスムージング回数を表示します。
マルチスペクトル表示:	複数のスペクトルを並べて表示できます。
スペクトルのベースライン位置設定:	ピークの左右1か所ずつに、スペクトルのベースライン位置を設定できます。
スペクトルのベースラインカット:	方法を指定して、スペクトルのベースラインカットを行います。
スペクトルページの自動スクロール:	ピークトップ位置設定を次々に行います。
スペクトルのCl,Br含有個数サーチ:	スペクトルのCl,Br含有個数サーチを行います。
シーケンス印刷設定:	シーケンスプログラムの定性印刷設定を定性プログラムに移動しました。
保持時間とI/Q比によるサーチ:	定量条件設定プログラムで設定した化合物テーブルの保持時間やI/Q比を用いて、化合物のサーチを行います。
スペクトルウィンドウの最大ページ数:	スペクトルウィンドウの最大ページ数は300ページになります。
ファイル比較画面での複数フォルダの対応:	ファイル比較画面にて、複数のフォルダ内のファイルを扱うことができます。

6.3.2 クロマトのラベリング

クロマト画面のピークに表示するラベルを選択できます。

1. メニューの[オプション(O)]-[クロマトピークのラベリング(C)]-[設定(E)]をクリックする。

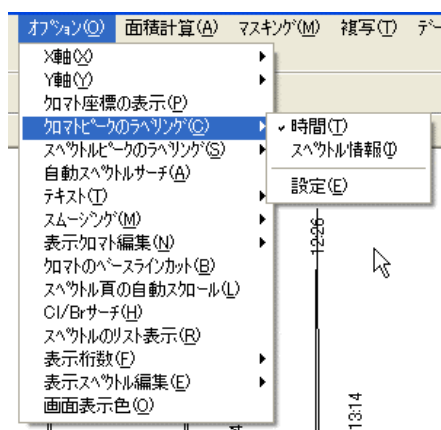


図 6.21

ラベリング設定画面が表示されます。

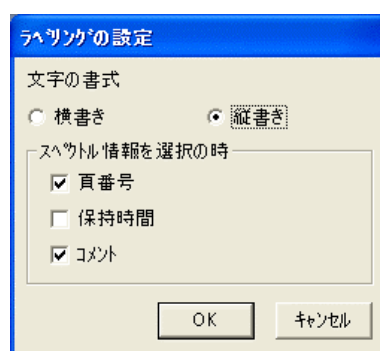


図 6.22

ラベリング設定画面で以下の項目を設定します。

- 文字の書式： ラベル表示の向きを、「横書き」、「縦書き」から選択します。
- 頁番号： 「スペクトル情報」を選択時にスペクトル頁番号を表示するか否かを設定します。
- 保持時間： 「スペクトル情報」を選択時に保持時間を表示するか否かを設定します。
- コメント： 「スペクトル情報」を選択時にスペクトル画面のコメントを表示するか否かを設定します。

2. ラベリング設定画面で各項目を設定して[OK]ボタンをクリックする。
3. メニューの[オプション(O)]-[クロマトピークのラベリング(C)]-[時間(T)]または[オプション(O)]-[クロマトピークのラベリング(C)]-[スペクトル情報(I)]をクリックする。
「時間」を選択したときは、クロマト表示に、時間のラベルを、設定した向きで表示します。
下図は文字の書式を「縦書き」に設定したときの表示です。

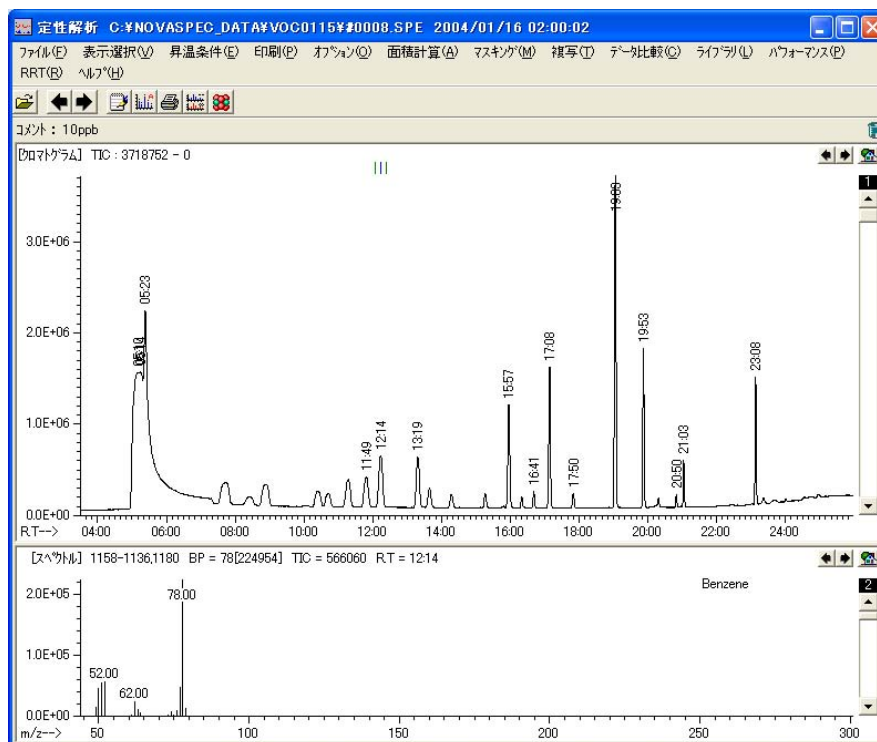


図6.23

「スペクトル情報」を選択したときは、クロマト表示に、ラベリングの設定画面で設定した情報を表示します。

下図は文字の書式を「縦書き」に設定し、「頁番号」と「コメント」をチェックしたときの表示です。

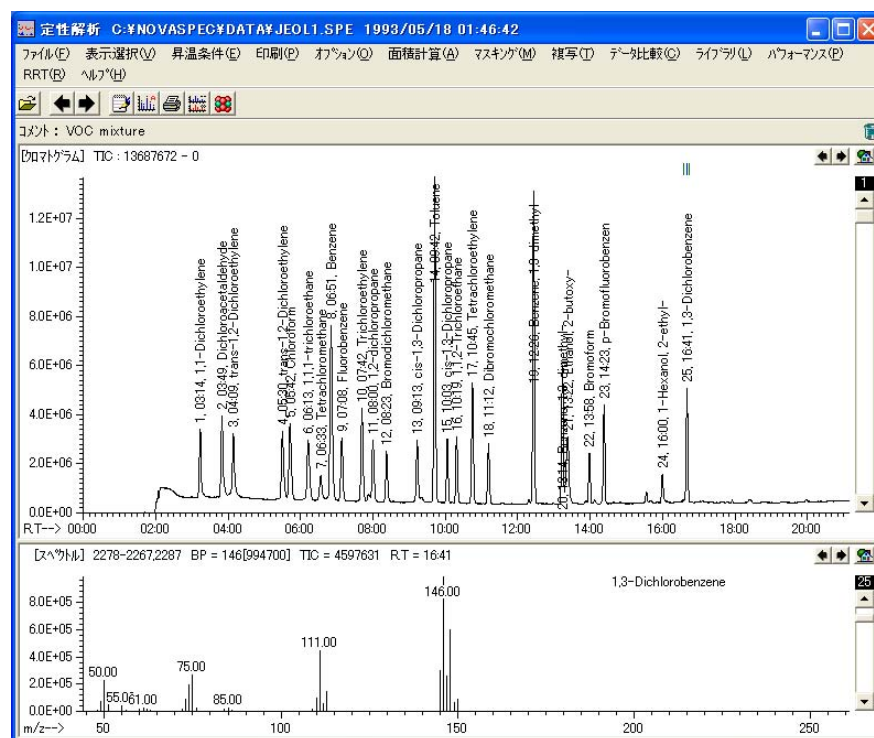


図6.24

6.3.3 ライブラリサーチのオプション設定

ライブラリサーチ時の閾値を設定することにより、サーチ結果の絞り込みができます。

1. メニューの[ライブラリ(L)]-[オプション(O)]をクリックする。
サーチオプション画面が表示されます。

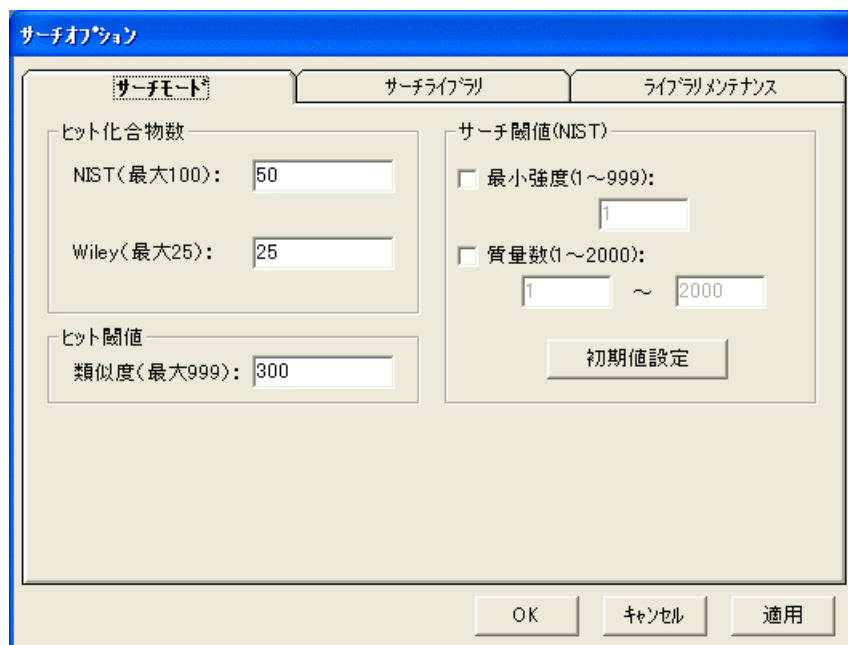


図6.25

サーチオプション画面の「サーチモード」タブで、以下の項目を設定します。

- | | |
|---------------|--|
| ヒット化合物数： | ライブラリサーチ時、表示するヒット化合物の最大値を設定します。使用するライブラリ毎 (NISTまたはWiley) に設定します。 |
| ヒット閾値： | 設定した類似度以上の場合のみヒット化合物とします。 |
| サーチ閾値 (NIST)： | |
| 最小強度： | サーチ時使用するスペクトルの強度を1～999に正規化して設定します。 |
| 質量数： | サーチ時使用する質量数範囲を設定します。 |

2. サーチオプション画面で[OK]ボタンをクリックする。

6.3.4 ライブラリサーチの化合物名転記

ライブラリサーチでヒットした化合物名をスペクトル画面に転記できます。

1. クロマト画面をマウスの左ボタンでクリックしてスペクトル表示位置を設定する。
詳しくはメインプログラム取扱説明書の8.3.2wをご覧ください。
2. ライブラリサーチを行う。
詳しくはメインプログラム取扱説明書の8.3.6aをご覧ください。
ヒット率のいちばん高い化合物名が、スペクトル画面に表示されます。

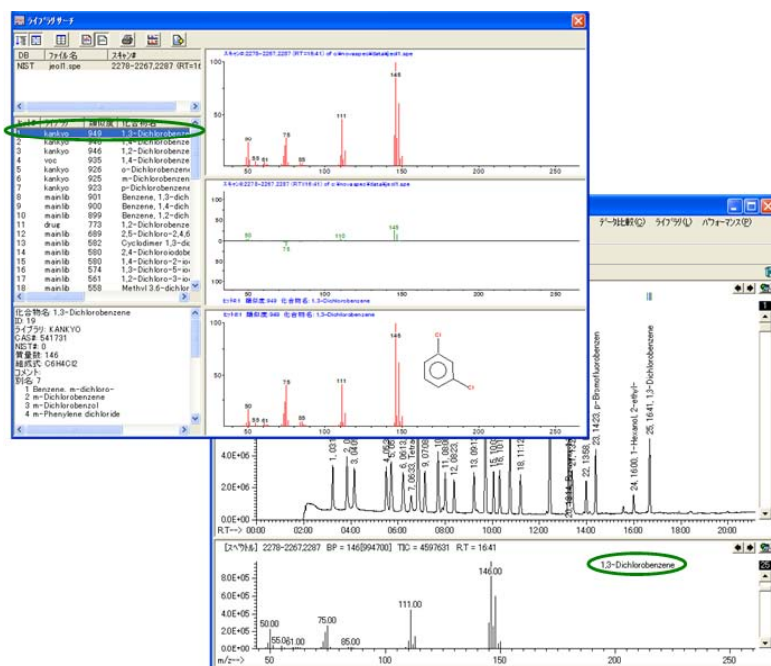


図6.26

ライブラリサーチ画面の検索化合物リストをクリックして、化合物名の選択を変更すると、スペクトル画面に表示される化合物名も変更されます。

6.3.5 リバースサーチ

表示されているクロマトに対して、リバースサーチを行えます。

1. ライブラリ照合画面を開く。

詳しくはメインプログラム取扱説明書の8.3.6bをご覧ください。

2. ライブラリ照合画面でリバースサーチを行う化合物を表示する。

照合の方法(「名称」、「ID#」、「組成式」、「質量数」、「CAS#」)は任意に選択できます。下記はCAS#で照合した場合の図です。

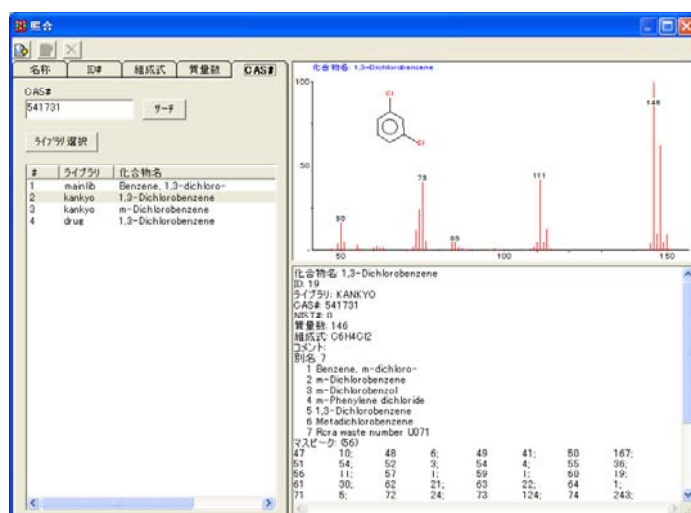


図6.27

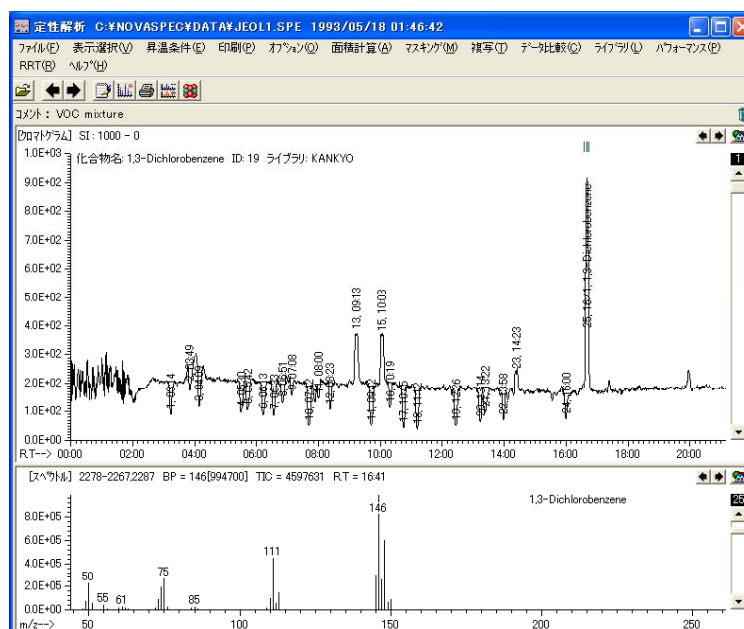
目次

3. メニューの[ライブラリ(L)]-[検索(S)]-[リバース(R)]をクリックする。

しばらくするとリバースサーチ結果がクロマト画面に表示されます。

リバースサーチ結果は、Y軸がヒット率になります。

下記は表示選択で「クロマト／スペクトル」を選択したときのリバースサーチ結果の表示画面です。



6.3.6 クロマトのベースラインカット

表示クロマトのベースラインをカットできます。

- ◆ メニューの[オプション(O)]-[クロマトのベースラインカット(B)]をクリックする。
ベースラインカットを行うとクロマト表示が下図のように変化します。

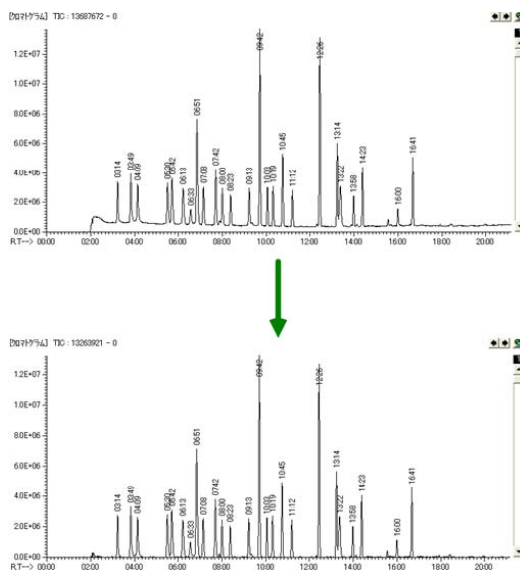


図6.30

6.3.7 マルチスペクトル表示

登録されているスペクトルを、縦に並べて、別画面に表示します。

- ◆ メニューの[表示選択(V)]-[マルチスペクトル(N)]をクリックする。
マルチスペクトル画面が表示されます。

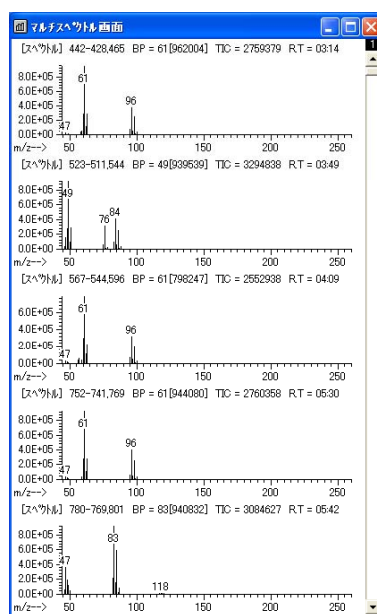


図6.31

6.3.8 スペクトルのベースライン位置設定

クロマト画面で、ピークトップ位置を設定した後、ピークトップ位置の左右にベースライン位置を設定できます。

1. クロマト画面でピークトップ位置をマウスの左ボタンでクリックする。
ピークトップ位置に青線が表示されます。

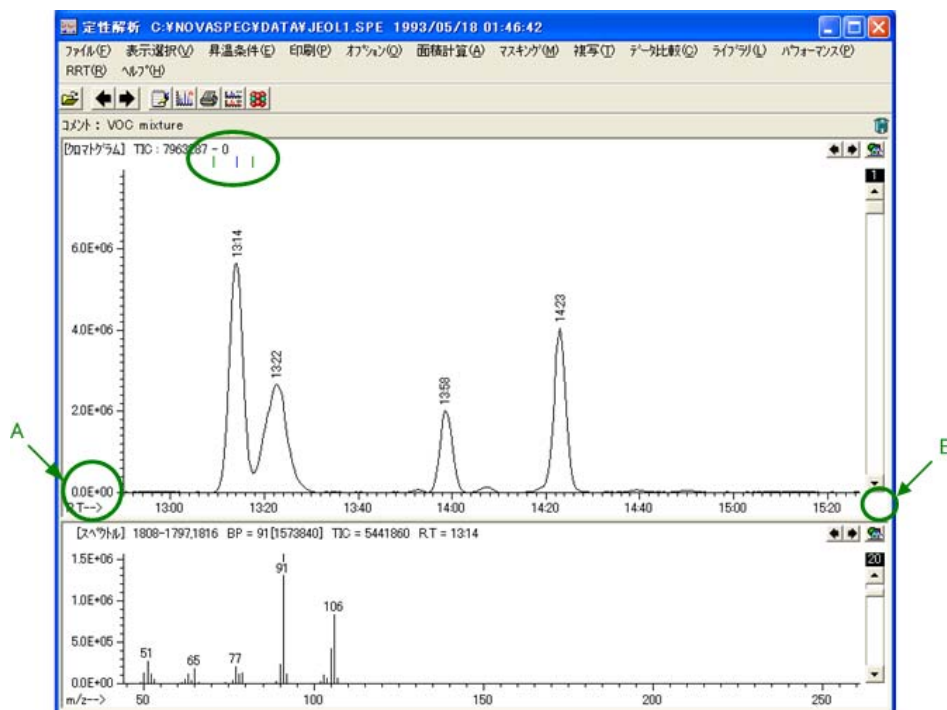


図6.32

2. クロマト画面でベースライン位置をマウスの右ボタンでクリックする。
ベースライン位置に緑線が表示されます。
ピークトップ位置の左右1か所ずつ設定できます。
右側ベースラインの位置の解除は、上図「A」の位置でマウスの右ボタンをクリックすることにより行います。左側ベースラインの位置の解除は、上図「B」の位置でマウスの右ボタンをクリックすることにより行います。

6.3.9 スペクトルのベースラインカット

任意の強度でスペクトルのベースラインカットを行えます。スペクトルのベースラインカットには2種類の方法があります。

6.3.9a レベルカット

スペクトル画面のX軸表示範囲についてすべてのデータから指定強度を減算します。

1. スペクトル画面にてAltキーを押しながら、マウスの左ボタンを押したまま上下に動かす。

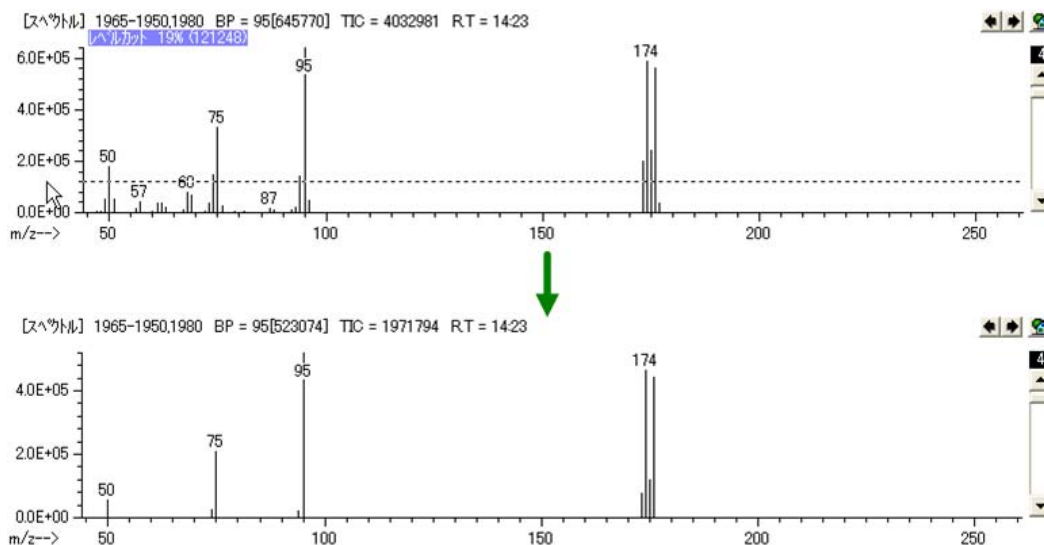


図6.33

スペクトル画面に、カットレベルを示す補助線が表示されます。

2. ベースラインカットを行う位置でマウスボタンを離す。

ベースラインカットされたスペクトルが表示されます。

ベースラインカットを解除するには、クロマト画面でピークトップまたはベースライン位置を再設定するか、スペクトル画面内の左右矢印ボタンを1回ずつクリックします。

6.3.9b ピークカット

スペクトル画面のX軸表示範囲についてカットレベル以下のデータを除去します。

1. スペクトル画面にてAltキーを押しながら、マウスの右ボタンを押したまま上下に動かす。

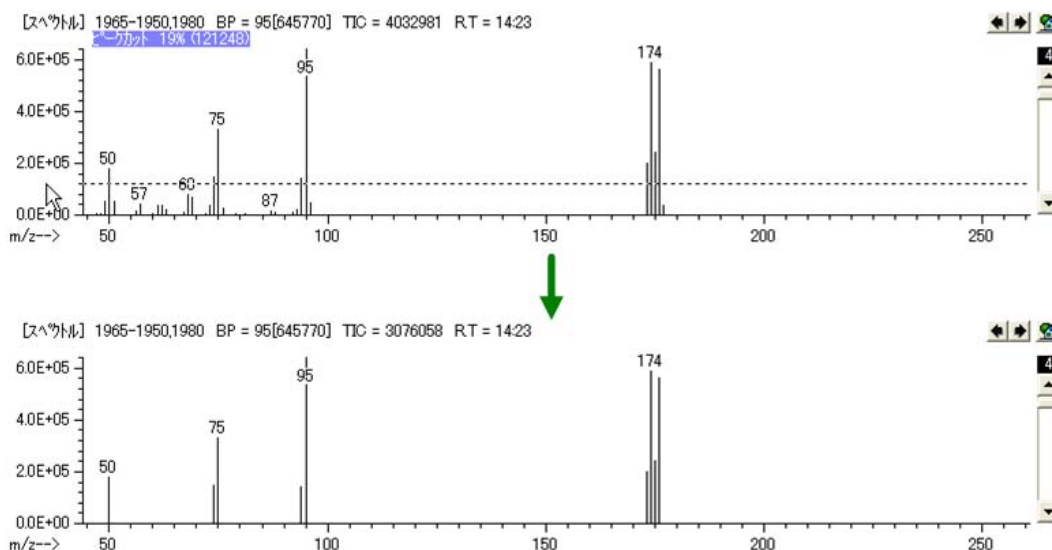


図6.34

スペクトル画面に、カットレベルを示す補助線が表示されます。

2. ベースラインカットを行う位置でマウスボタンを離す。

ベースラインカットされたスペクトルが表示されます。

ベースラインカットを解除するには、クロマト画面でピークトップまたはベースライン位置を再設定するか、スペクトル画面内の左右矢印ボタンを1回ずつクリックします。

6.3.10 スペクトルページの自動スクロール

クロマト画面でスペクトルピーク位置を設定すると、スペクトル画面が次のページに移動します。

1. メニューの[オプション(O)]-[スペクトル頁の自動スクロール]をクリックする。

「スペクトル頁の自動スクロール」にチェックマークが付きます。すでに「スペクトル頁の自動スクロール」にチェックマークが付いているときにこの操作を行うと、チェックマークが外れ、スペクトルページの自動スクロールは解除されます。

2. クロマト画面にてスペクトルピーク位置を設定する。

スペクトル画面が次のページに移動します。

6.3.11 スペクトルのCl,Br含有個数サーチ

スペクトルのCl,Br含有個数サーチを行います。

1. サーチを行うデータファイルを読み込んで、スペクトルを表示する。

スペクトルの表示方法についてはメインプログラム取扱説明書の8.3.2wをご覧ください。

スペクトル画面のX軸は適宜拡大します。

質量数の大きい方がヒット率が良くなります。

2. メニューの[オプション(O)]-[Cl/Brサーチ(H)]をクリックする。

Cl/Brサーチ画面が表示されます。

6.3.12 シーケンス印刷設定

シーケンスプログラムで行っていた、「定性印刷設定」を本プログラムから行います。

1. データファイルを読み込む。

☞ 詳しくはメインプログラム取扱説明書の「8.3.2a」項をご覧ください。

2. メニューの[印刷(P)]-[設定]をクリックする。

シーケンスの印刷設定画面が表示されます。設定後[OK]ボタンをクリックします。

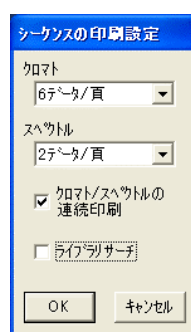


図6.35

以下の設定を行います。

クロマト: クロマトの印刷サイズを設定します。「なし」を設定するとクロマトの印刷は行いません。

スペクトル: スペクトルの印刷サイズを設定します。「なし」を設定するとスペクトルの印刷は行いません。登録されているスペクトルがない場合も印刷を実行しません。

クロマト／スペクトルの連続印刷:

クロマトを印刷後、改ページをしないでスペクトル印刷する場合にチェックします。

ライブラリサーチ: スペクトルのライブラリサーチを実行し、結果を印刷する場合にチェックをします。登録されているスペクトルがない場合、クロマト画面の1ページ目に登録されているクロマトで自動スペクトルサーチを行い、その結果登録されるスペクトルでライブラリサーチを実行して結果を印刷します。

-  ・クロマト／スペクトルの連続印刷をONにした場合、クロマト、スペクトルの印刷サイズの設定により、クロマトとスペクトルの間にスペースができます。クロマト、スペクトルの設定を同一サイズにするか、片方が他の整数倍か整数分の1にすることをお勧めします。
- ・定性解析のプリンタ設定で指定した印刷の向きが、シーケンス実行に設定されます。
- ・マルチクロマト表示画面で表示条件の保存を行うと、クロマトの印刷は「1データ／頁」固定になります。マルチクロマトで登録したクロマトが多段で印刷されます。
- ・すべてのピークの面積表示画面で表示条件の保存を行うと、クロマトの印刷は「1データ／頁」固定になります。クロマト画面の1ページ目に登録されたクロマトのピークをサーチし、面積、高さ、相対比を印刷します。
- ・S/N表示画面で表示条件の保存を行うと、クロマトの印刷は「2データ／頁」固定になります。クロマト画面の1ページ目に登録されたクロマトのピークをサーチし、クロマトとS/Nを印刷します。
- ・ライブラリサーチ結果の印刷フォーマットは、ライブラリサーチ画面の[印刷]ボタンをクリックしたときに表示される印刷設定画面で設定されます。ライブラリサーチ画面での印刷設定は、メインプログラム取扱説明書の8.3.6aをご覧ください。

3. メニューの[印刷(P)]-[プレビュー]をクリックする。

登録した印刷設定で、プレビュー画面が表示されます。

4. メニューの[ファイル(F)]-[表示条件を保存(S)]をクリックする。

「名前を付けて保存」ダイアログが表示されます。ファイル名を付けて表示条件を保存します。拡張子はCNDになります。ここで設定した印刷条件をシーケンス実行時に適用させたい場合は、シーケンスプログラムでここで作成したCNDファイルを登録します。

6.3.13 保持時間とI/Q比によるサーチ

定量条件設定プログラムで設定した化合物テーブルの保持時間やI/Q比を用いて、化合物のサーチを行います。

1. サーチを行うデータファイルを読み込む。

☞ 詳しくはメインプログラム取扱説明書の「8.3.2a」項をご覧ください。

2. メニューの[表示選択(V)]-[マルチクロマト(M)]をクリックする。

クロマト画面の表示方法がマルチクロマトに変わります

3. 定量条件設定プログラムの化合物テーブルに各パラメータを入力、またはファイルから読み込む。

☞ 化合物テーブルについては「3.2」節をご覧ください。

4. 化合物テーブルにてサーチを行いたい化合物を列選択しそのままドラッグし、定性プログラムにドロップする。

化合物テーブルの1列目をクリックすることにより列選択がされます。

下図の部分をクリックすると全化合物が選択されます。

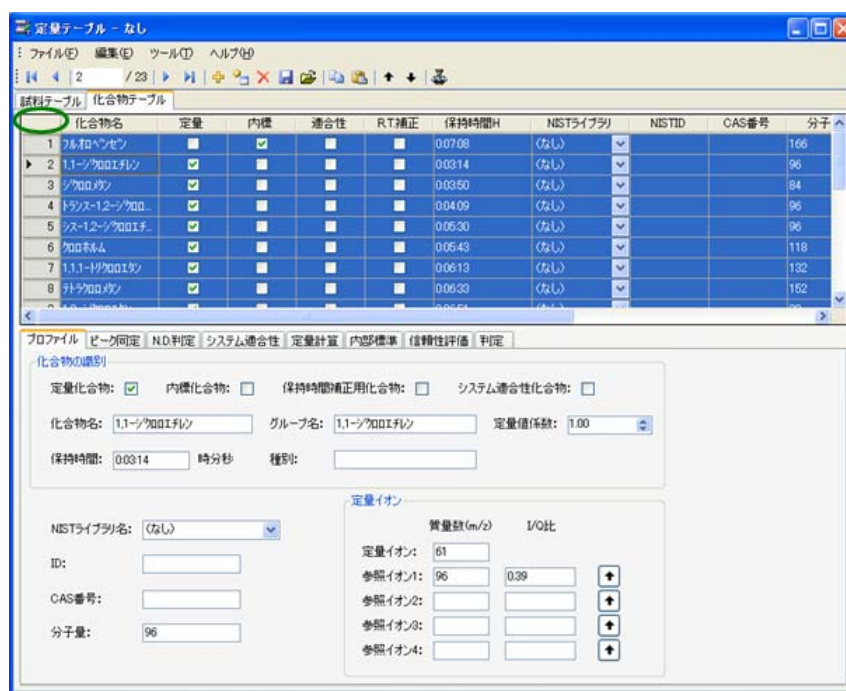


図6.36

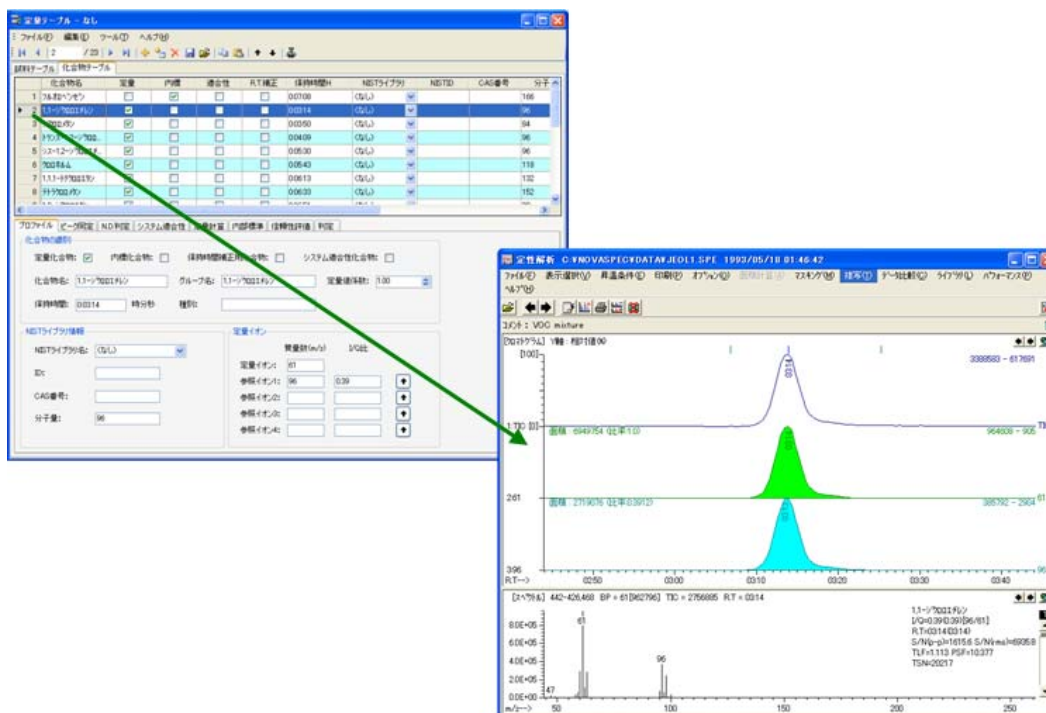


図6.37

クロマト表示画面には、ドロップした化合物の定量イオンと参照イオンのマスクロとTICが表示されます。またスペクトル画面のコメントには、サーチ結果が表示されます。

スペクトル画面のコメントには以下の情報が表示されます。

化合物名, IQ比設定値, IQ比実測値, 保持時間設定値, 保持時間実測値, S/N (P-P), S/N (RMS), TLF (テーリング係数), PSF (ピーク分離度), TSN (理論段数)

6.4 シーケンス

多成分定量処理プログラムをインストールすることにより、シーケンスプログラムも更新されます。ここではシーケンスプログラムの使用方法について説明いたします。

✂ ここで説明するシーケンスプログラムは、アジレント社製ガスクロマトグラフ6890Nが接続されている場合にのみ使用します。

6.4.1 シーケンスプログラムの起動

- ◆ Q1000GCメインプログラム画面の「Q1000GCアプリケーションアイコングループ内「シーケンス」アイコンをクリックする。



図6.38

シーケンスプログラム初期画面が表示されます。

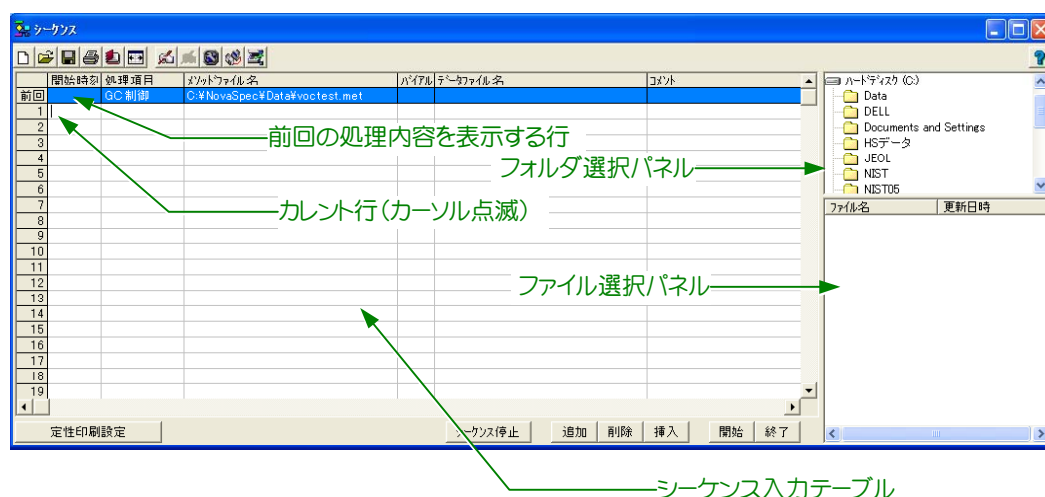


図6.39

✂ 処理項目が設定されていないと、ファイル選択パネルにファイル名は表示されません。

初期画面上のツールバーの機能は以下ようになります。

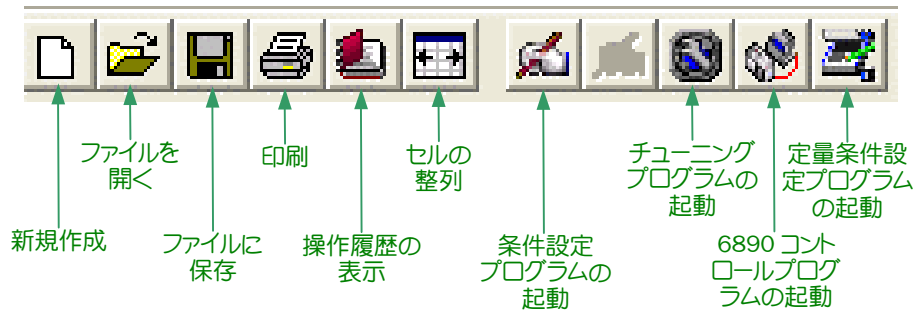


図6.40

 シーケンス実行中は、テーブルのクリア・保存・印刷、チューニングプログラムの起動、6890コントロールプログラムの起動はできません。

6.4.2 シーケンスの作成方法

シーケンス入力テーブルの1行に1処理項目を記述します。

1行目には前回終了時最後の項目が表示されています。

1. 「処理項目」で項目を選択する。

「処理項目」をクリックしますと、「処理項目」にアップダウンボタンが表示されます。アップダウンボタンをクリックすることにより「処理項目」を選択できます。

	開始時刻	処理項目	メソッドファイル名
前回		GC 制御	C:\NovaSpec\Data\vocetest.met
1		測定	
2			

図6.41

以下の項目から選択します。

処理項目	
真空排気	真空排気を行います。
チューニング	登録されているチューニングファイルの条件でチューニング処理を行います。実際の処理は、チューニングプログラムを起動して行います。
真空停止	真空停止を行います。
GC制御	登録されているメソッドファイルのGC条件を6890GCへ設定します。
測定	登録されているメソッドファイルのMS条件でMS測定を行います。実際の測定は、測定プログラムを起動することにより行います。
定性解析	登録されている定性条件ファイルの条件で定性解析処理を行います。実際の定性解析処理は定性プログラムを起動して行います。
定量解析	登録されている定量条件ファイルの条件で定量解析処理を行います。実際の定量解析処理は定量プログラムを起動して行います。
測定／解析	登録されている定量条件ファイルの条件で測定から定量解析まで行います。実際の測定は、測定プログラムを起動することにより行います。実際の定量解析処理は多成分定量プログラムを起動して行います。

目次

2. 「メソッドファイル名」を入力する。

「メソッドファイル名」をクリックしますと、「処理項目」で選択した処理に対応したメソッドファイルが、ファイル選択パネルに表示されます。設定するファイル名をファイル選択パネルにてダブルクリックすることにより、「メソッドファイル名」に選択したファイル名が入力されます。

各処理項目に対応したメソッドファイルの種類を以下に示します。

処理項目	メソッドファイル種類	拡張子
真空排気	なし	なし
チューニング	チューニングパラメータファイル	TUN
真空停止	なし	なし
GC制御	メソッドパラメータファイル	MET
測定	メソッドパラメータファイル	MET
定性解析	定性解析パラメータファイル	CND
定量解析	定量解析パラメータファイル	QNT
測定／解析	多成分定量解析パラメータファイル	QNS

「処理項目」が測定／解析のときに「メソッドファイル名」を選択しますと、多成分定量解析パラメータファイルの試料テーブルからデータファイル名、バイアル番号、コメントが読み込まれ、シーケンステーブルに展開されます。展開された行は、編集することはできません。

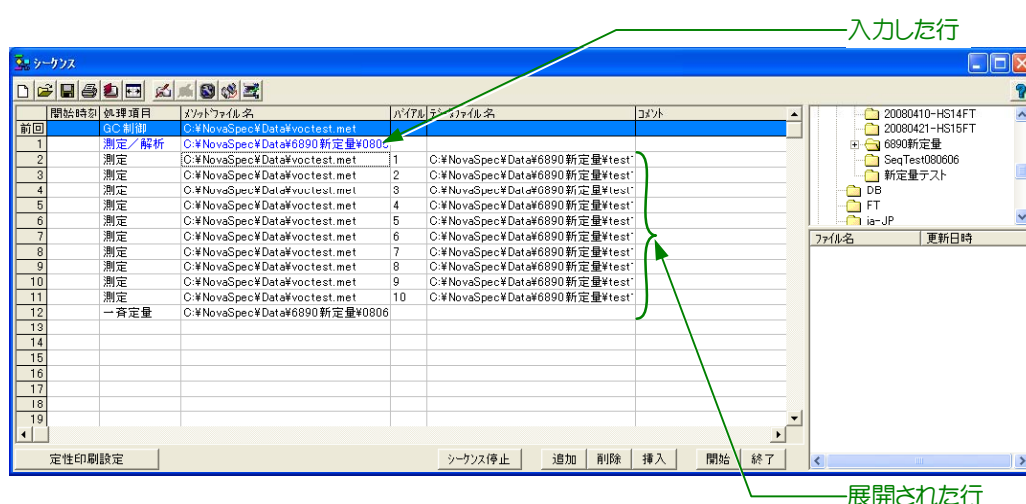


図6.42

3. 「処理項目」に測定が設定されて、オートインジェクタからの試料注入を行う場合は、「バイアル」のセルをクリックし、バイアル番号を入力する。
手動注入の場合はこの欄は空白にします。空白の場合は、実行時に測定プログラムが起動し、GCのスタート待ちとなります。
4. 「データファイル名」を入力する。
「処理項目」で測定または定性解析を選択した場合に「データファイル名」を入力します。「データファイル名」をクリックし、フォルダ選択パネルでデータファイルの保存フォルダを選択します。その後「データファイル名」を手入力します。「処理項目」で定性解析を選択した場合は、ファイル選択パネルからファイル名を選択することができます。
また次の手順で、定量解析パラメータファイル（QNTファイル）の試料テーブルからデータファイル名やコメントを読み込むことができます。
 - a. ファイル選択パネルで右クリックする。
サブメニューが表示されます。
 - b. サブメニューで「定量ファイル表示」を選択する。
ファイル選択パネルに定量解析パラメータファイル（QNTファイル）が表示されます。
 - c. ファイル選択パネルからデータを読み込みたい定量解析パラメータファイル（QNTファイル）をダブルクリックする。
定量解析パラメータファイル（QNTファイル）の試料テーブルの内容が、シーケンステーブルに読み込まれます。
5. 「処理項目」に測定が設定されている場合、「コメント」に任意のコメントを入力する。
6. 「開始時刻」に開始時刻またはインターバルを入力する（任意）。
開始時刻を設定する場合は、時分をコロンで区切って24時間法で入力します。インターバルを設定する場合はインターバルを分単位で入力します。

6.4.3 シーケンステーブルでの編集

6.4.3a 追加

シーケンステーブルの最終行の内容で新規行を追加することができます。

1. 最終行から追加する行数目の任意のセルをクリックする。
2. 「追加」ボタンをクリックする。
指定行数分新規行が追加されます。「追加」ボタンはシーケンステーブル下部にあります。

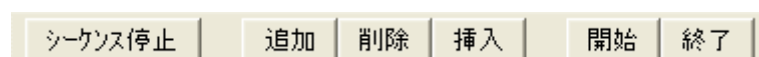


図 6.43

6.4.3b コピー条件設定

上記の行追加を行う時の、コピー条件を登録することができます。

1. シーケンステーブル上でマウスの右ボタンを押す。
サブメニューが表示されます。

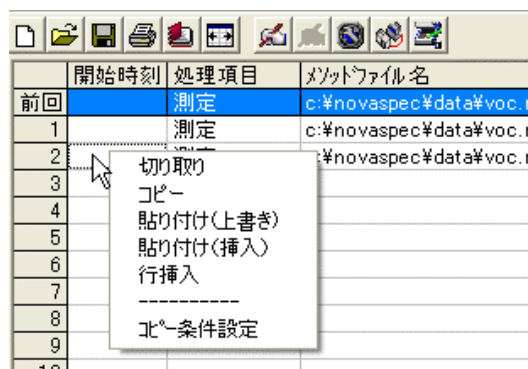


図 6.44

2. 「コピー条件設定」をクリックする。
コピー条件設定画面が表示されます。

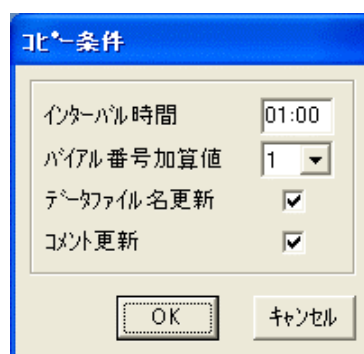


図 6.45

3. 各項目を入力して[OK]ボタンをクリックする。

インターバル時間	コピー元に「開始時刻」が設定されていた場合に加算する時間を「時：分」で設定します。
バイアル番号加算値	コピー元のバイアル番号に加算する値を設定します。
データファイル名更新	チェックが付いている場合、データファイル名に1を加算します。
コメント更新	チェックが付いている場合、コメントに1を加算します。

6.4.3c 削除

シーケンステーブルの指定行を削除します。

1. シーケンステーブルで削除する行の任意のセルをマウスの左ボタンでクリックする。
2. [削除]ボタンをクリックする。
指定行が削除されます。
[削除]ボタンはシーケンステーブル下部にあります。

6.4.3d 挿入

空行を挿入します。

1. シーケンステーブルで空行を挿入する行の任意のセルをマウスの左ボタンでクリックする。
2. [挿入]ボタンをクリックする。

指定行のすぐ上に空行が1行挿入されます。

[挿入]ボタンはシーケンステーブル下部にあります。

 サブメニューから「行挿入」を選択しても、同様に空行が1行挿入されます。

6.4.3e 切り取り

シーケンステーブルの指定行を切り取ります。複数行を指定することもできます。

1. 削除する行をマウスの左ボタンで指定する。

マウスの左ボタンを押しながら移動させることにより、複数行を選択できます。選択されている行は、バックグラウンドカラーが水色になります。

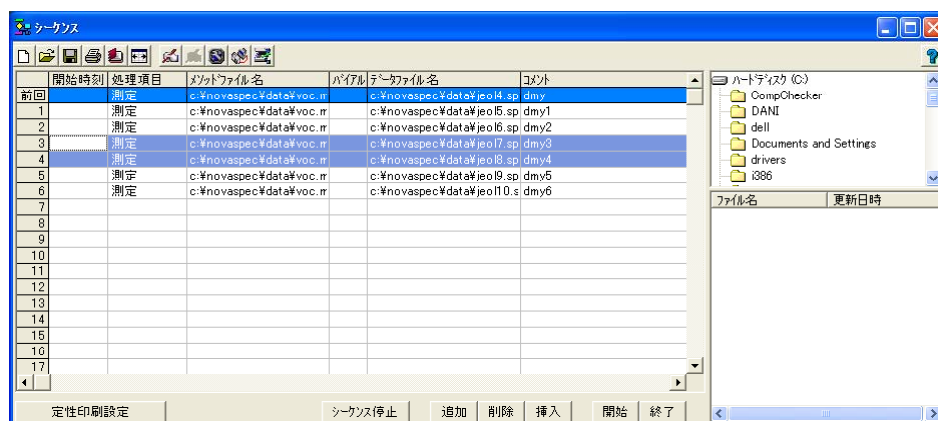


図 6.46

2. 指定した行でマウスの右ボタンを押す。

サブメニューが表示されます。

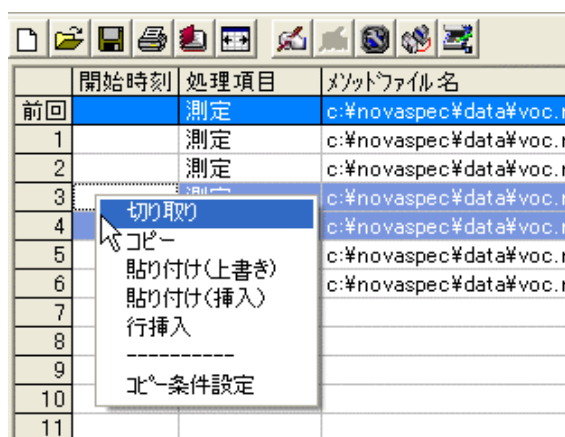


図 6.47

3. サブメニューで「切り取り」を選択する。
指定行が切り取られます。
 切り取った行は「貼り付け」ができます。

6.4.3f コピー

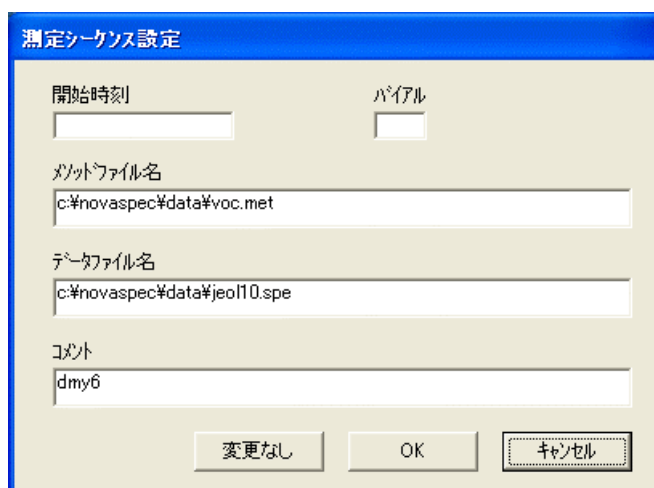
シーケンステーブルの指定行をコピーします。複数行を指定することもできます。

1. コピーする行をマウスの左ボタンで指定する。
マウスの左ボタンを押しながら移動させることにより、複数行を選択できます。選択されている行は、バックグラウンドカラーが水色になります。
2. 指定した行でマウスの右ボタンを押す。
サブメニューが表示されます。
3. サブメニューで「コピー」を選択する。
指定行がコピーされます。

6.4.3g 貼り付け(上書き)

「切り取り」や「コピー」を行った行を、上書きで他の行に「貼り付け」できます。

1. 上書きで貼り付けを行う行の任意のセルをクリックする。
複数行を貼り付ける場合、貼り付けるいちばん上の行を指定します。
2. 指定した行でマウスの右ボタンを押す。
サブメニューが表示されます。
3. サブメニューで「貼り付け(上書き)」を選択する。
貼り付け条件設定画面が表示されます。
コピー元のデータが表示されます。



The dialog box titled "測定シーケンス設定" (Measurement Sequence Setting) contains the following fields and buttons:

- 開始時刻** (Start Time): A text input field.
- バッチ** (Batch): A text input field.
- メタファイル名** (Metafile Name): A text input field containing "c:\novaspec\data\voc.met".
- データファイル名** (Datafile Name): A text input field containing "c:\novaspec\data\jeol10.spe".
- コメント** (Comment): A text input field containing "dmy6".
- Buttons:** "変更なし" (No Change), "OK", and "キャンセル" (Cancel).

図6.48

貼り付けるに当たり、コピー元の各データを変更することができます。

4. [OK]ボタンをクリックする。
コピー元データが、指定行に上書きで貼り付きます。

6.4.3h 貼り付け(挿入)

「切り取り」や「コピー」を行った行を、挿入で他の行に「貼り付け」できます。

- 1. 挿入で貼り付けを行う行の任意のセルをクリックする。
- 2. 指定した行でマウスの右ボタンを押す。
サブメニューが表示されます。
- 3. サブメニューで「貼り付け(挿入)」を選択する。
貼り付け条件設定画面が表示されます。
コピー元のデータが表示されます。
貼り付けるに当たり、コピー元の各データを変更することができます。
- 4. [OK]ボタンをクリックする。
コピー元データが指定行上部に挿入されます。

6.4.4 シーケンス処理

6.4.4a シーケンス開始

- ◆ [開始]ボタンをクリックする。
シーケンステーブルに設定された処理を順番に実行します。
「開始」ボタンをクリックしますと、シーケンステーブル下部のボタンが変更されます。

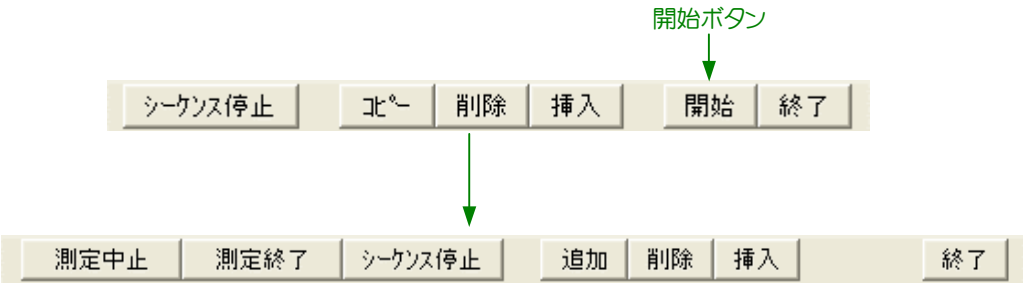


図6.49

「開始時刻」または「待ち時間」が設定されている場合は、プログラムは設定時間まで待機状態になります。待機状態の行は橙色の表示に変わります。
実行中の行は緑字の表示に変わります。終了した行はグレー字の表示に変わります。

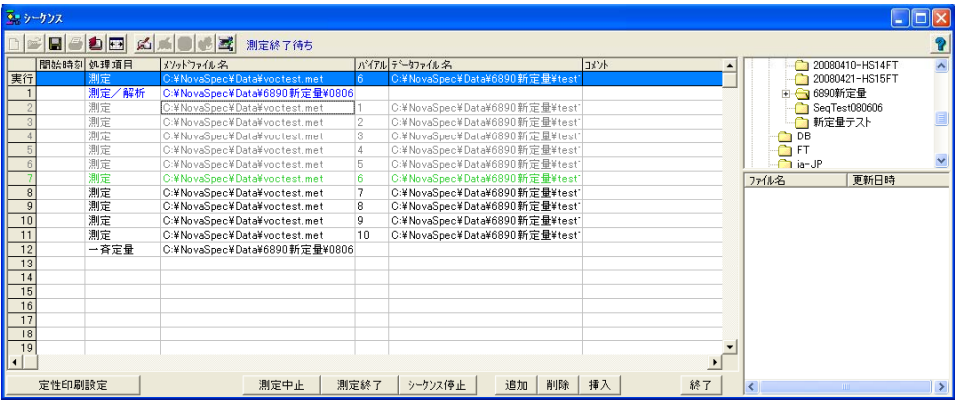


図6.50

6.4.4b シーケンス停止

- ◆ [シーケンス停止ボタン]をクリックする。
現在実行中の処理が終了した時点でシーケンスを停止させます。

6.4.4c 測定中止

- ◆ [測定中止]ボタンをクリックする。
現在実行中の「測定」を中止します。測定結果ファイル (speファイル) は作成されません。シーケンスは次行の処理に移ります。
 GCに対して測定の中止コマンドは送りません。

6.4.4d 測定終了

- ◆ [測定終了]ボタンをクリックする。
現在実行中の「測定」を中止します。測定結果ファイル (speファイル) は作成されます。シーケンスは次行の処理に移ります。
 GCに対して測定の中止コマンドは送りません。

6.4.5 測定

測定プログラムは、シーケンスプログラムからのみ起動されます。単独での起動はできません。

1. シーケンステーブルに制御項目を登録する。
 登録方法は「6.4.2」項を参照ください。
2. シーケンスを開始する。
 開始方法は「6.4.4」項を参照ください。
処理項目が「測定」の行に制御が移ると、測定プログラムが起動されます。測定プログラムの起動画面を以下に示します。

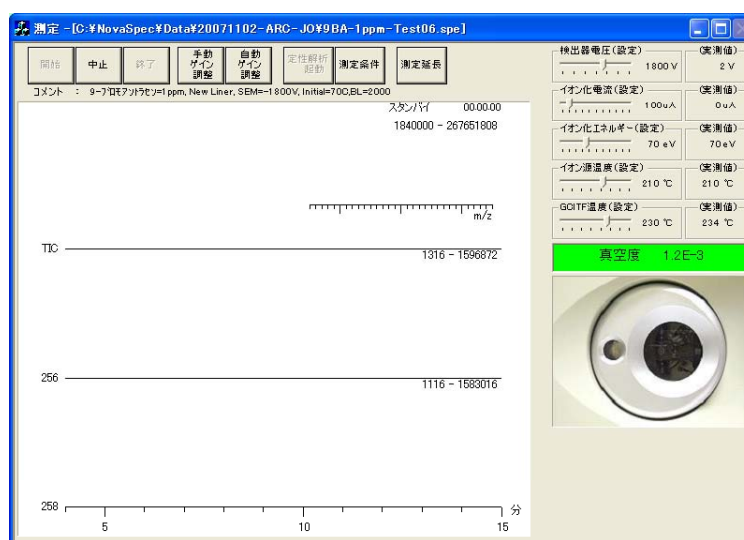


図 6.51

測定画面では以下の操作が可能です。

- a. TIC/クロマトの縦軸スケール値の自動変更は, [自動ゲイン調整]ボタンを右クリックする。

最大ピークを100%に変更して再表示されます。

- b. TIC/クロマトの縦軸スケール値の手動変更や表示マスクロの設定は, [手動ゲイン調整]ボタンをクリックする。

以下の画面が表示されます。



図6.52

- c. 上図の「上限値」と「下限値」に設定値を入力する。
- d. マスクロを表示させたいときは, 上図の質量数の数値入力ボックス内に質量数を入力し, 「表示」のチェックマークをいれる。
- e. スペクトルを表示させるにはスペクトル・フォーム内の[オン]を, 表示させたくないときは[オフ]をクリックする。
- f. TIC/クロマト画面の表示色および背景色を変更するには, 質量数入力ボックスをクリックして, [背景色変更]ボタンか[表示色変更]ボタンをクリックする。スペクトルの表示色変更を行うには, スペクトル・フォーム内の[表示色変更]ボタンをクリックする。

以下の画面が表示されます。



図6.53

g. 色を指定し, [OK]ボタンをクリックする。

-  TIC, スペクトルの表示間隔は, メソッド条件にもよりますが, 通常は約10秒です。
-  画面のスペクトルは, 表示間隔の間に取り込まれたデータの極大ピーク位置のスペクトルです。変更はできません。
-  同一画面上に表示できるイオンクロマトは最大7です。最上段のTICは変更できません。
-  表示のグループは最大8まで設定しておくことができます。

h. 測定中のデータを解析したい場合は, 測定画面のクロマト上をダブルクリックする。
定性解析プログラムが起動し, TICを表示します。

i. 測定の延長を行うには, [測定延長]ボタンをクリックする。
以下の画面が表示されます。

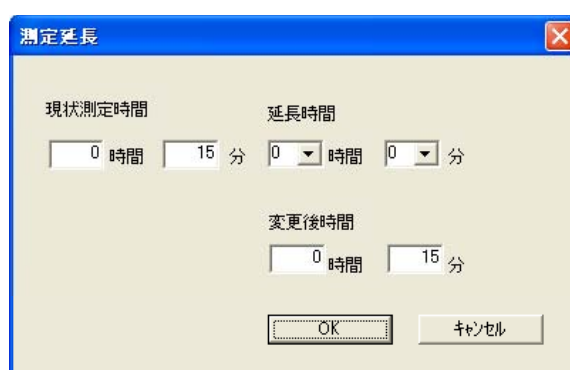


図6.54

- j.** 延長時間のプルダウンリストから延長時間を選択し, [OK]ボタンをクリックする。
- k.** 測定を途中で終了させるには, [終了]ボタンをクリックする。
データファイルは作成されます。
- l.** 測定を途中で中止させるには, [中止]ボタンをクリックする。
データファイルは作成されません。
-  測定が終了すると, フィラメントは「オフ」になります。

6.4.6 他のプログラムの起動

6.4.6a チューニングプログラムの起動

- ◆ ツールバーの[チューニングプログラム起動]ボタンをクリックする。
チューニングプログラムが起動されます。

6.4.6b 条件設定プログラムの起動

- ◆ ツールバーの[条件設定プログラムの起動]ボタンをクリックする。
条件設定プログラムが起動されます。

6.4.6c 定量条件設定プログラムの起動

- ◆ ツールバーの[定量条件設定プログラムの起動]ボタンをクリックする。
定量条件設定プログラムが起動されます。

6.4.7 その他の機能

6.4.7a 新規作成

- ◆ ツールバーの[新規作成]ボタンをクリックする。
シーケンステーブルの内容をクリアします。

6.4.7b シーケンスファイルの読み込み

1. ツールバーの[ファイルを開く]ボタンをクリックする。
ファイル読み込みダイアログ画面が表示されます。読み込むファイルの拡張子はseqです。

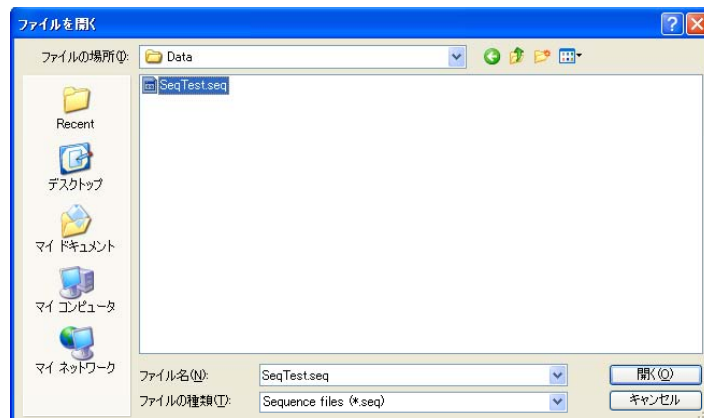


図 6.55

2. フォルダおよびファイル名を選択して[OK]ボタンをクリックする。
指定したシーケンスファイルが読み込まれて、シーケンステーブルに表示されます。

6.4.7c シーケンスファイルの保存

1. ツールバーの[ファイルに保存]ボタンをクリックする。
ファイル保存ダイアログ画面が表示されます。

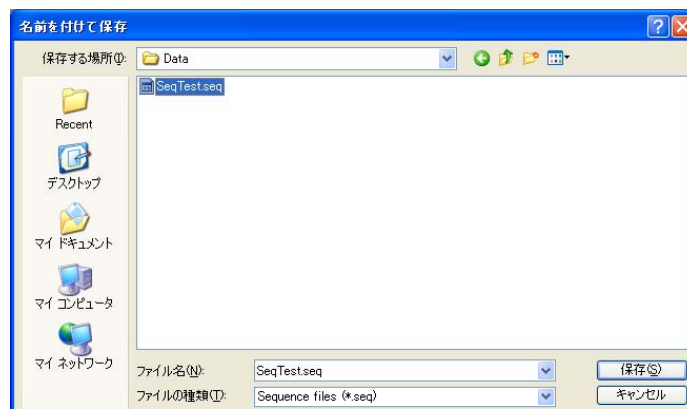


図 6.56

2. フォルダを選択し、ファイル名を入力して[OK]ボタンをクリックする。
seqという拡張子で設定内容がファイルに保存されます。

目次

6.4.7d 印刷

- ◆ ツールバーの[印刷]ボタンをクリックする。
シーケンステーブルに登録された項目が、デフォルトプリンタに印刷されます。

6.4.7e 履歴の表示

- ◆ ツールバーの[操作履歴の表示]ボタンをクリックする。
シーケンスプログラムでの処理履歴を表示します。

実行日時	リスト名	処理項目	データファイル名	バッチ番号	デバイス名	コピート	状態
2007/11/16 11:31:21		GC測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHHS-VOC-トラップ2.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 15:16:28		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 16:05:10		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 16:23:08		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 16:37:16		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-test-2ul.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 16:51:25		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-test-3ul.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 17:05:37		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-test-4ul.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 17:25:51		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-30ul-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 17:43:08		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-1ul-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 18:00:27		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-2ul-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 18:17:44		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-3ul-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 18:35:03		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-4ul-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 18:52:21		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-5ul-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 19:09:41		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-10ul-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 19:26:59		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-15ul-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 19:44:16		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-20ul-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 20:01:35		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-25ul-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/16 20:18:56		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-30ul-test.met	2			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/19 13:36:37		GC測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHHS-VOC-トラップ2.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/19 18:34:42		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-30ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/19 19:15:17		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-1ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/19 19:52:49		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-2ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/19 20:19:36		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-3ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 09:26:14		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-4ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 11:34:40		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-5ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 12:30:47		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-4ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 13:17:33		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-test-2ul.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 13:31:20		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-test-3ul.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 15:01:35		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-4ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 15:30:40		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-5ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 17:23:44		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-1ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 17:52:54		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-2ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 18:22:17		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-3ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 18:51:40		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-4ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 19:21:09		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-5ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 19:50:37		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-10ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 20:20:04		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-15ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 20:49:36		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-20ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 21:19:01		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-25ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC
2007/11/20 21:48:26		測定	C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC-JOHPTV-solvent-30ul-test.met	1			C:\NovaSpec\NovaSpecData\20071102-ARC

図 6.57

6.4.7f 整列

- ◆ ツールバーの「整列」ボタンをクリックする。
画面サイズにより、各列の幅を調整します。

6.5 基準辞書のメンテナンス

基準辞書ファイルには化合物毎のプロファイルデータや基準値が書かれています。基準辞書ファイルはMicrosoft Excel (以下Excel) 形式のテーブルまたはMDB形式のデータベース (以下データベース) に保存されます。出荷時は以下の2種類の基準辞書ファイルが保存されています。

上水： 水道法による水質基準および水質管理目標設定項目等に定められた化合物について基準値を設定しています。上水基準辞書の編集はExcelで行い、定量プログラムではExcelテーブルから基準値を求めます。

食品農薬： 300強の化合物について、ポジティブリストの食物分類毎に基準値を設定しています。基準値の設定がない化合物については、一律基準 (0.01ppm) を適用します。食品農薬基準辞書の編集はExcelで行い、それをデータベースに変換します。定量プログラムでは、設定された食物分類からデータベースを検索して基準値を求めます。

基準辞書のメンテナンスは以下の2つのプログラムを用います。

基準辞書編集プログラム： 基準辞書の新規登録、基準辞書ファイルを編集するために起動する等、基準辞書のメンテナンスを行うプログラムです。

基準値データベース作成プログラム：

食品農薬基準辞書の作成はExcelで行いますが、検索を早くするためにデータベースの形式に変換する必要があります。基準値データベース作成プログラムは、Excel形式で作成した食品農薬基準辞書ファイルをデータベース形式に変換するプログラムです。

 基準辞書に登録されている基準値を使用する場合、基準値は必ず官報等で確認をお願いいたします。

6.5.1 基準辞書の編集

6.5.1a 基準辞書編集プログラムの起動

- ◆ Q1000GCメインプログラム画面の「Q1000GCツール」アイコングループ内、「基準辞書編集」アイコンをダブルクリックする。



図6.58

基準辞書編集画面が表示されます。



図6.59

- ✗ 定量プログラムまたは定量条件設定プログラムが起動中のときは、当プログラムの起動はできません。

6.5.1b 基準辞書の新規登録

1. 基準辞書編集画面で追加ボタンをクリックする。
基準辞書名ダイアログボックスが表示されます。

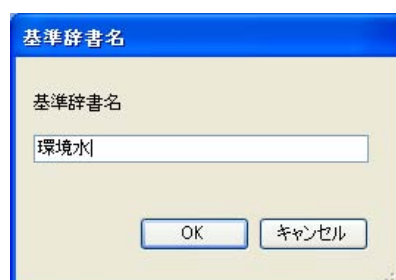


図6.60

2. 基準辞書名を入力する。

現在登録されている基準辞書の名称と重複しない名称を入力します。

3. [OK]ボタンをクリックする。

入力された基準辞書名で新規基準辞書を登録し、Excel形式のファイルが作成されます。基準辞書ファイルは、定量プログラムがインストールされたフォルダに保存されます。すでに基準辞書名でExcel形式のファイルが存在する場合は何も操作はしません。

6.5.1c 基準辞書の削除

1. 削除する基準辞書名をマウスの左ボタンでクリックする。

基準辞書名が選択状態になります。

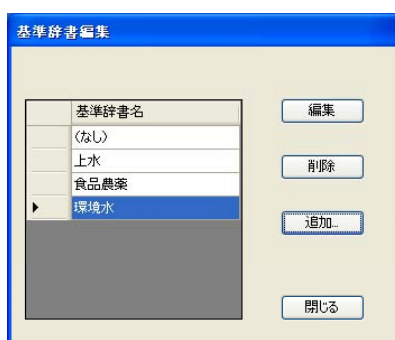


図6.61

2. [削除]ボタンをクリックします。

指定した基準辞書が登録削除されます。Excelファイルは削除されませんので、削除した名称で新規作成を行うと、Excelファイルはそのまま使用できます。

 出荷時に登録されている基準辞書(上水, 食品農薬)は削除できません。

6.5.1d 基準辞書の編集

1. 削除する基準辞書名をマウスの左ボタンでクリックする。

基準辞書名が選択状態になります。

2. [編集]ボタンをクリックする。

指定した基準辞書 (Excelファイル) が開きます。

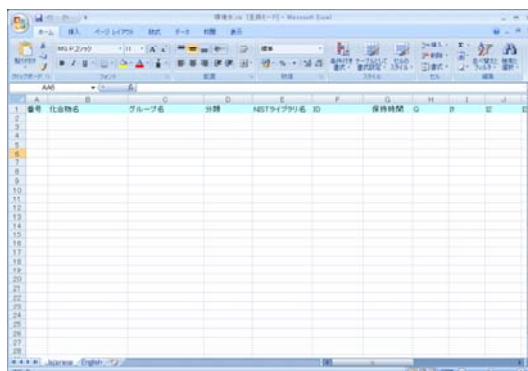


図6.62

目次

上図は作成直後の基準辞書です。基準辞書の列並びは以下の順番である必要があります。

番号:	任意の番号を指定します。
化合物名:	化合物名を指定します。
グループ名:	グループ名を指定します。
分類:	「IS」と入力すると内標準化合物として認識します。 「ALKANE」と入力すると保持時間補正用化合物として認識します。
NISTライブラリ名:	化合物が登録されているNISTスペクトルライブラリのライブラリ名を指定します。
ID:	上記で指定したライブラリでのIDを指定します。
保持時間:	保持時間を 時:分:秒 の形式で指定します。
Q:	定量イオンの質量数を指定します。
I1:	参照イオン1の質量数を指定します。
I2:	参照イオン2の質量数を指定します。
I3:	参照イオン3の質量数を指定します。
I4:	参照イオン4の質量数を指定します。
Q面積:	定量イオンの面積を指定します。面積かIQ比のどちらかを設定します。
I1面積:	参照イオン1の面積を指定します。面積かIQ比のどちらかを設定します。
I2面積:	参照イオン2の面積を指定します。面積かIQ比のどちらかを設定します。
I3面積:	参照イオン3の面積を指定します。面積かIQ比のどちらかを設定します。
I4面積:	参照イオン4の面積を指定します。面積かIQ比のどちらかを設定します。
I1/Q比:	定量イオンと参照イオン1のIQ比を指定します。
I2/Q比:	定量イオンと参照イオン2のIQ比を指定します。
I3/Q比:	定量イオンと参照イオン3のIQ比を指定します。
I4/Q比:	定量イオンと参照イオン4のIQ比を指定します。
質量数:	化合物の質量数を指定します。
組成式:	化合物の組成式を指定します。
CAS:	化合物のCAS番号を指定します。
ユーザー1:	任意の文字列を指定できます。
ユーザー2:	任意の文字列を指定できます。
ユーザー3:	任意の文字列を指定できます。
ユーザー4:	任意の文字列を指定できます。
基準値:	基準値をmg/L単位で指定します。

6.5.2 基準値データベース作成

6.5.2a 基準値データベース作成プログラムの起動

- ◆ Q1000GCメインプログラム画面の「Q1000GCツール」アイコングループ内、「基準値DB作成」アイコンをダブルクリックする。



図6.63

基準値DB作成プログラム画面が表示されます。

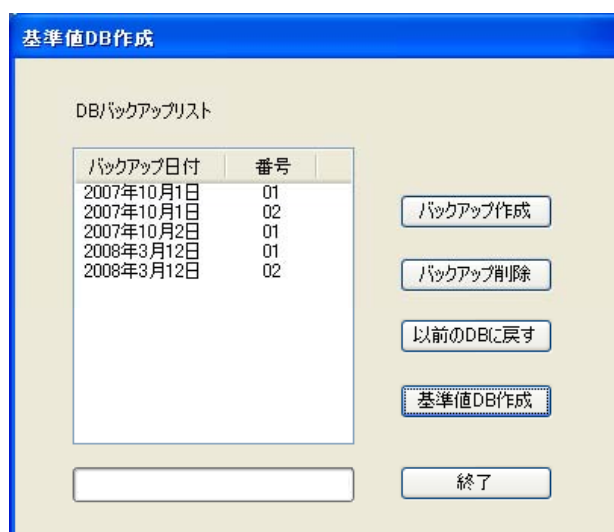


図6.64

- ✗ 定量プログラムまたは定量条件設定プログラムが起動中のときは、当プログラムの起動はできません。

6.5.2b 基準値データベースの作成

- ◆ 基準値DB作成画面で[基準値DB作成]ボタンをクリックする。
Excelで作成した、食品農薬基準辞書ファイルをデータベース形式に変換します。変換には10分から20分程度を要します。
データベース形式に変換時に、以前のデータベース形式の食品農薬基準辞書ファイルを自動的にバックアップします。

6.5.2c 基準値データベースのバックアップ

◆ 基準値DB作成画面で[バックアップ作成]ボタンをクリックする。

データベース形式の食品農薬基準辞書ファイルのバックアップが作成されます。バックアップ一覧は、DBバックアップリストに表示されます。

- ✂ ・以前バックアップした食品農薬基準辞書ファイルに戻すには、DBバックアップリストで、戻すバックアップを指定して、以前のDBに戻すボタンをクリックします。
- ・以前バックアップした食品農薬基準辞書ファイルを削除するには、DBバックアップリストで、削除するバックアップを指定して、バックアップ削除ボタンをクリックします。